基于决策图的哈密顿量模拟

Aaron Sander* Lukas Burgholzer* Robert Wille*§
*慕尼黑工业大学设计自动化教席，德国慕尼黑 §软件能力中心哈根贝格（SCCH）有限公司，奥地利哈根贝格 aaron.sander@tum.de，lukas.burgholzer@tum.de，robert.wille@tum.de https://www.cda.cit.tum.de/research/quantum/

arXiv:2305.02337v2 [quant-ph] 1 Mar 2024

摘要——**本文提出一种使用决策图（DD）的哈密顿量模拟新方法。决策图是一种精确表示方式，通过利用量子态和量子操作表示中的冗余来实现。尽管哈密顿量模拟已得到广泛研究，但将这类模拟扩展到更大或更复杂的系统往往颇具挑战，可能需要采用近似方法或全新的模拟方法。决策图提供了这样一种尚未应用于哈密顿量模拟的替代方案。本文研究决策图在这一任务中的表现。为此，我们回顾决策图的基本原理，例如其构造方式，并介绍如何在这种数据结构中实现哈密顿量模拟所需的相关操作，从而提出首个基于决策图的哈密顿量模拟方法。基于多组评估和比较结果，我们进一步探讨了这种互补方法的性能表现。总体而言，这些研究表明，决策图确实有望成为一种新的数据结构，在某些示例中，相较于最先进的方法可实现数量级的性能提升；但它也有自身截然不同的局限性。**

索引词—**决策图、量子模拟、张量网络、量子计算**

I. 引言

哈密顿量模拟是理解复杂物理系统行为 [1]–[4] 以及可映射为哈密顿量的相关问题 [5]–[7]的有力工具。然而，由于表示量子态和算符所需复数的数量呈指数级增长，开发高效且准确的模拟方法仍是一项重大挑战。因此，诸如态矢模拟器 [8]–[10]这类直接方法很快就会遭遇可扩展性问题。张量网络 [11], [12]或神经网络量子态 [13]–[15]等专用数据结构，在处理大型复杂系统时仍能力有限，难以避免达到内存或运行时间需求的极限——这促使研究人员探索更多互补方法，以克服某些类别问题中的这一限制 [16], [17]。

本文介绍决策图 （DD），将其作为模拟哈密顿量的一种新型数据结构。决策图历来在经典计算领域取得了巨大成功，可高效地表示和操作布尔函数，进而表示和操作经典电路及系统 [18], [19]。受其在经典计算中的应用启发，决策图被扩展到量子领域，成为量子电路模拟 [20], [21], 、量子电路综合 [22]–[24], 、量子电路验证 [25],以及浅层电路测量 [26] 的核心数据结构。然而，它们尚未应用于更一般的量子系统。其主要优势在于利用量子态和操作中的冗余，从而显著压缩表示这些结构所需的内存，并减少执行计算所需的运行时间。本文将阐明决策图模拟哈密顿量的能力，并提出将其作为其他先进方法的补充工具。

为此，我们首先在第二节回顾哈密顿量模拟的基础知识，并在第三节介绍使用当前最先进方法模拟哈密顿量系统的局限性。基于此，我们随后在第四节将决策图作为一种新颖的互补方法加以介绍，力求内容自成一体，无需读者具备计算机科学背景。最终，这将引出首个基于决策图的哈密顿量模拟方法。

随后，我们开展了多轮评估与比较，以深入了解这一互补方法的性能。所得结果（总结于第五节）清楚地表明，对于某些示例，基于决策图的哈密顿量模拟相较于当前最先进的方法，即基于稀疏计算、态矢量模拟器和张量网络的方法，能够带来数量级的性能提升。我们还探究了这一替代方案的局限性；与当前最先进的方法相比，决策图的局限性在根本上有所不同，因此需要转换视角，才能充分发挥其优势。通过这些研究，我们得出结论：决策图为哈密顿量模拟提供了一种前景广阔的新型数据结构，可与现有方法互为补充，因此有望继续在开发高效、准确的模拟方法方面发挥重要作用。

II. 哈密顿量模拟

本节回顾哈密顿量模拟的主要概念。虽然对各项内容的介绍都较为简短，但感兴趣的读者可参阅 [27]–[29] 了解更多信息。

A. Quantum 动力学

哈密顿量模拟 是一种用于模拟物理系统动力学的计算技术。系统的能量被编码到一个称为哈密顿量 的数学对象中，用于描述系统的相互作用和量子态。在此基础上，通过求解针对某个量子态 $|\Psi\rangle$ 和哈密顿量 H的含时薛定谔方程，可以确定系统的动力学，即：

$$\frac{d}{dt}|\Psi\rangle = -\frac{i}{\hbar}H|\Psi(t)\rangle\,. \tag{1}$$

由此得到幺正时间演化算符 $U(t)$，用于计算某个时间 t的量子态，即：

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}\,|\Psi(0)\rangle =: U(t)\,|\Psi(0)\rangle\,, \tag{2}$$

其中 $\hbar = 1$ 为简便起见。随后可以利用期望值计算称为可观测量的可测物理量的动态变化，即：

$$\langle O(t)\rangle = \langle\Psi(t)|O|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|U^{\dagger}(t)OU(t)|\Psi(0)\rangle\,. \tag{3}$$

可通过可观测量分析的物理量包括系统的能量、磁化强度以及系统中的粒子数 [30]。

B. 乘积公式

定义式 (2) 中时间演化算符的矩阵指数通常难以计算，甚至无法计算，尤其是在其规模和复杂度不断增大时。为了在受控的误差范围内实现时间演化，可以使用李乘积公式将该算符分解为更简单、更高效的运算 [27], [28]。根据*Baker-Campbell-Hausdorff* （BCH）公式，矩阵指数可分解为其各个组成项，即：

$$e^{xA}e^{xB} = e^{x(A+B)+\frac{1}{2}x^2[A,B]+\mathcal{O}(x^3)}, \tag{4}$$

其中 $[A,B]$ 是 A 和 B 的对易子，定义为$[A,B] := AB - BA$。

由此得到矩阵形式的指数恒等式 $e^a e^b = e^{(a+b)}$，通常称为一阶*Suzuki-Trotter* 分解，即：

$$e^{x(A+B)} = e^{xA}e^{xB} + \mathcal{O}(x^2). \tag{5}$$

由此可以直接得出。

$$e^{(A+B)} = \left(e^{\frac{A+B}{n}}\right)^n = \lim_{n\to\infty}\left(e^{\frac{A}{n}}e^{\frac{B}{n}}\right)^n. \tag{6}$$

因此，由项之和 $H = A + B$ 描述的哈密顿量的幺正时间演化可以近似为一系列离散时间步 $\delta t = \frac{t}{n}$，即，

$$U(t) = e^{-iHt} \approx \left(e^{-i\delta tA}e^{-i\delta tB}\right)^n = \left(U(\delta t)\right)^n, \tag{7}$$

其中，n 被称为 特罗特步数。根据式（4），当 A 和 B 对易时，该近似是精确的，因为此时 $[A,B] = 0$。一般而言，近似误差（称为 *Trotter* 误差）随哈密顿量 H 中非对易项的数量增加而增大（根据式（4））。因此，含有更多非对易项的哈密顿量在使用乘积公式时需要更多特罗特步来补偿误差。不过，这也意味着乘积公式在模拟含有对易项或近似对易项的哈密顿量时表现尤其出色，在这种情况下只需要较少的特罗特步数。

有关考虑系统规模等更具体参数的更精确误差界的概述，请参见 [29]。

C. 伊辛模型

本文将主要研究作为一类重要哈密顿量代表的横向场伊辛模型。在其一般形式下，该模型描述相互作用粒子的自旋，其哈密顿量表示为

$$H = -\sum_{\langle i,j\rangle} J_{ij}\sigma_x^{[i]}\sigma_x^{[j]} - \sum_j g_j\sigma_z^{[j]}, \tag{8}$$

其中，J_{ij} 是位于 $\langle i、\ j\rangle$ 处的最近邻自旋对之间的相互作用强度，g_j 是位于 j处、垂直于相互作用方向的外场。它是哈密顿量模拟的自然起点，因为可用它来构造许多计算难题，例如自旋玻璃、二次无约束二元优化问题 （QUBO）或图划分 [5]。本文余下部分将使用这种哈密顿量的以下受限版本来阐释所有提出的概念和方法。

示例 1. 该 L位有限一维伊辛链定义为

$$H = -J\sum_{\ell=0}^{L-2}\sigma_x^{[\ell]}\sigma_x^{[\ell+1]} - g\sum_{\ell=0}^{L-1}\sigma_z^{[\ell]}, \tag{9}$$

其中参数与位点无关，即 $J_{ij} := J$ 和$g_\ell := g$。使用乘积公式，该模型下的单个特罗特步形式为

$$U(\delta t) = \prod_{\ell=0}^{L-2} e^{i\,J\delta t\,\sigma_x^{[\ell]}\sigma_x^{[\ell+1]}} \prod_{\ell=0}^{L-1} e^{i\,J\delta t\,\sigma_z^{[\ell]}}, \tag{10}$$

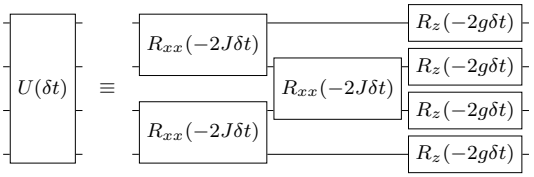
其中每一项由旋转门定义

$$\begin{aligned} R_{xx}(\theta) &= e^{-i\frac{\theta}{2}(\sigma_x\otimes\sigma_x)} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) & 0 & 0 & -i\sin(\frac{\theta}{2}) \\ 0 & \cos(\frac{\theta}{2}) & -i\sin(\frac{\theta}{2}) & 0 \\ 0 & -i\sin(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) & 0 \\ -i\sin(\frac{\theta}{2}) & 0 & 0 & \cos(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{11}$$

and

$$\begin{aligned} R_z(\theta) &= e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_z} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{12}$$

对于一个四位链，这种分解等价于电路形式：先将旋转门应用于偶数位点，再应用于奇数位点，如下图所示：



D. 海森堡模型

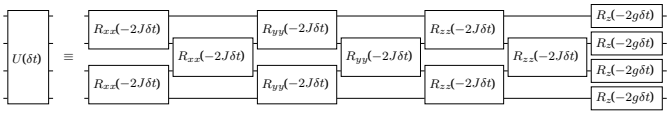
本文还考虑了一种相关模型，称为海森堡模型 [31] ，该模型考虑了沿 y 轴和 z 轴的额外自旋耦合。该模型由哈密顿量表示。

$$\begin{aligned} H = &-J_x\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_x^{[i]}\sigma_x^{[j]} - J_y\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_y^{[i]}\sigma_y^{[j]} \\ &- J_z\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_z^{[i]}\sigma_z^{[j]} - h\sum_j\sigma_z^{[j]}. \end{aligned} \tag{13}$$

示例 2. *XXX* 海森堡模型是海森堡模型的一个子集，满足 $J_x = J_y = J_z$。 L 位点的有限一维 *XXX* 海森堡链定义为

$$H = -J\Big(\sum_{\ell=0}^{L-2}\sigma_x^{[\ell]}\sigma_x^{[\ell+1]} + \sum_{\ell=0}^{L-2}\sigma_y^{[\ell]}\sigma_y^{[\ell+1]} + \sum_{\ell=0}^{L-2}\sigma_z^{[\ell]}\sigma_z^{[\ell+1]}\Big) - h\sum_{\ell=0}^{L-1}\sigma_z^{[\ell]}. \tag{14}$$

对于四位链，单个特罗特步分解等价于下图所示的电路：



III. 动机

上文综述的哈密顿量模拟，是理解量子系统在不同条件下行为的重要工具。运用量子模拟开展的物理学研究，有助于我们探索新现象，并加深对量子系统基本运行机制的理解。同时，量子模拟对材料科学和化学也具有重要意义，使研究人员能够设计和开发新材料，并研究分子层面的化学反应。

通过使用哈密顿量模拟量子系统的行为，研究人员可以深入了解量子系统的动力学，并更好地理解它们在不同条件下的表现。这是衔接理论与实验结果的重要一步，也有助于加快新型量子器件和量子硬件的开发。通过模拟这些器件的行为，研究人员可以优化其设计并提升其性能。

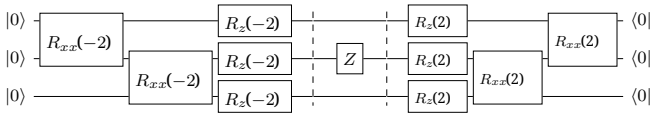
哈密顿量模拟的另一个重要应用是复杂系统优化。机器学习 [32]和物流 [33]等领域中的许多问题都可以映射到哈密顿量，使研究人员能够在给定约束条件下探索能量景观和时间动力学。这有助于找到复杂问题的最优解，并推动从药物设计到金融建模等领域的创新。

A. 一般问题

然而，尽管应用范围广泛，哈密顿量模拟的核心仍然依赖于对量子系统的描述，而这种描述会随系统规模呈指数增长。量子态和算符（例如用于表示哈密顿量的算符）通常分别由复向量和矩阵描述。例如，对于由L d级系统组成的系统，量子态 $|\Psi\rangle$ 可以表示为 $\mathbb{C}^{d^L}$中的一个向量，而算符 O 可以表示为 $\mathbb{C}^{d^L\times d^L}$中的一个矩阵。随着系统规模和相互作用的复杂度增加，由于内存需求和计算运行时间呈指数增长，这些对象在模拟时会变得越来越难以进行计算。

因此，需要专门的数据结构，以便在经典计算机上高效地模拟量子系统，同时能够良好地随系统规模和复杂度进行缩放。这包括开发新的算法和技术，以更加易于管理的方式表示指数增长。这样便可以研究更复杂的现象，并设计新型材料和器件。随着量子技术不断发展，这些经典方法对于在广泛的应用中模拟和理解量子系统，将变得越来越重要。

例 3. 再次考虑例 *1* 中的情形。为简单起见，令 $J = g = 1$。假设系统从全零量子态开始，即 $|\Psi(0)\rangle = |0\ldots0\rangle$，并且我们关注可观测量 $O = \sigma_z^{[1]}$在 $t = 1$处的期望值。那么，使用单个特罗特步，因此有 $\delta t = \frac{t}{n} = 1$，对应于下图所示的计算：



这可以应用于多个 t 值，从而对可观测量随时间演化的多个时刻进行采样。虽然理论上很简单，但即使只计算单个时刻的期望值，在系统规模较大时，计算开销也会变得十分巨大。

B. 相关工作

过去，人们提出了各种经典方法，以不同的方式解决这一问题背后的复杂度。每种模拟方法都有其自身的优势和局限性，具体采用哪种方法取决于模拟的特定需求，因此这些方法可以被视为彼此互补。

更准确地说，一种能够节省内存和计算时间的直接方法，是利用只存储非零项的稀疏向量和矩阵 [34]。这种方法不需要将时间演化算符分解为局部操作，但仍会随系统规模呈指数级增长，并且需要直接构造幺正时间演化算符。由于许多线性代数软件包（例如 SciPy）都直接支持稀疏数据结构以及稀疏矩阵指数等运算，因此这种方法很容易使用 [35]。

态矢量模拟 [8]–[10] 是另一种用于模拟量子系统的方法，它将大型幺正算符分解为电路，如第 II-B 节所述的乘积公式。这种方法非常适合模拟小型系统，且不受长程相互作用或深层电路的限制。不过，由于仍需存储态矢量的所有振幅，其开销会随系统规模呈指数级增长。

另一方面，张量网络的提出旨在解决量子多体系统中态矢量模拟的指数缩放问题 [11], [12]。它们使用局部张量描述量子态和运算，使其复杂度基于面积定律随系统规模线性增长 [36]。张量网络可以表示比状态向量方法更大的系统规模

，但深层电路或具有长程相互作用的哈密顿量等复杂运算需要用更大的张量来表示，从而导致运算的计算成本高昂，并需要大量内存存储 [37]。时间演化块解耦（TEBD）算法基于第二-B节所述的乘积公式，局限于短程相互作用、浅层电路和一维几何结构。该方法中运算收缩顺序的优化是一个活跃的研究领域 [38]–[42]。此外，还可以截断张量中的数值，从而得到量子态的近似 [43]。

此外，还有其他相关的先进模拟方法并非基于乘积公式。例如，克雷洛夫子空间方法，如时间依赖变分原理（TDVP， [44]），不受短程相互作用的限制，但计算成本更高。神经网络量子态（NQS， [13]–[15]）也是一种有前景的方法，可利用蒙特卡罗方法进行近似模拟，但对于较大的系统规模，可能需要指数级数量的样本 [45]。

尽管所有这些方法都提升了我们的模拟能力，但每种方法都有其局限性，因此没有一种方法能完美解决所有问题。鉴于此，我们仍需要能够进一步拓展这些能力的替代方法。

IV. 决策图

本节介绍一种新颖且互补的方法，利用（量子）决策图（DD）对哈密顿量进行经典模拟。决策图是一种受二进制决策图（BDD）启发的数据结构，后者在计算机科学中常用于表示和处理布尔函数 [18]。具体而言，本文所讨论的决策图是一种带有复数边权重的有向无环图，可用于表示和处理量子态与算符。决策图已在经典量子电路模拟 [20],[21],、综合 [22]–[24], 、验证 [25],以及浅层电路的测量 [26]中展现出潜力。然而，它们在哈密顿量模拟中的应用尚未得到探索。本节余下部分将介绍作为哈密顿量模拟数据结构的决策图。我们力求使介绍尽可能自成一体，无需读者具备任何计算机科学背景。

A. 表示量子态

将量子态表示为决策图的探索始于单格点系统这一简单情形。此类系统的量子态 $|\Psi\rangle$ 由两个复数归一化振幅 α_0 和 α_1描述，即

$$|\Psi\rangle = \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle , \tag{15}$$

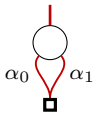
其中， $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 是一个二能级系统的计算基态。通常将其表示为量子态矢量。

$$|\Psi\rangle \equiv \begin{pmatrix} \alpha_0 & \alpha_1 \end{pmatrix}^\top . \tag{16}$$

由式（15）可以得到一个相当简单的观察结果及推论：该向量可以等分为来自$|0\rangle$ 量子态（α_0）的贡献和来自 $|1\rangle$ 量子态（α_1）的贡献，即，

$$\overbrace{\begin{matrix} |0\rangle & |1\rangle \end{matrix}}^{|\Psi\rangle}\begin{pmatrix} \alpha_0 & \alpha_1 \end{pmatrix}^\top . \tag{17}$$

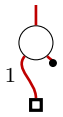
这种分解是决策图形式体系的核心。表示 $|\Psi\rangle$ 的决策图具有如下结构

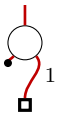
$|\Psi\rangle \equiv (\alpha_0 \quad \alpha_1)^\top \equiv$ 

. (18)

它由一个节点 组成，该节点带有一条入边，表示进入决策图的入口；此外还有两个后继节点，表示式（17）所示的分解，并以终端 节点（黑色方框）结束。量子态的振幅标注在相应的边上。未标注的边对应边权重 1。

例 4. 考虑计算基态 $|0\rangle$ 和$|1\rangle$。那么，相应的决策图具有如下结构

$|0\rangle \equiv (1 \quad 0)^\top \equiv$ 

$|1\rangle \equiv (0 \quad 1)^\top \equiv$ 

. (19)

在每种情况下，其中一个后继节点以终端节点结束，另一个则以零短枝 （以黑点表示）结束——这显然与相应的向量描述相似。

在单站点态的直观理解基础上，我们可以将其推广到更大的系统。

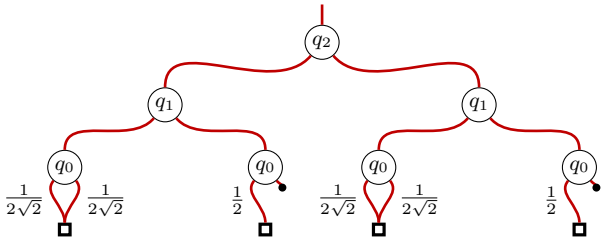
示例 5. 考虑以下三站点系统的态矢量：

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^T \tag{20}$$

然后， $|\Psi\rangle$ 可以类似于式（17）递归地拆分成大小相等的部分，即：

$$\overbrace{\overbrace{\overbrace{\begin{matrix} |000\rangle & |001\rangle \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{matrix}}^{|00q_0\rangle}\overbrace{\begin{matrix} |010\rangle & |011\rangle \\ \frac{1}{2} & 0 \end{matrix}}^{|01q_0\rangle}}^{|0q_1q_0\rangle}\overbrace{\overbrace{\begin{matrix} |100\rangle & |101\rangle \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{matrix}}^{|10q_0\rangle}\overbrace{\begin{matrix} |110\rangle & |111\rangle \\ \frac{1}{2} & 0 \end{matrix}}^{|11q_0\rangle}}^{|1q_1q_0\rangle}}^{|q_2q_1q_0\rangle}\begin{pmatrix} \end{pmatrix}^\top , \tag{21}$$

其中 q_2、q_1、$q_0 \in \{0,1\}$。这可以直接转化为决策图形式：

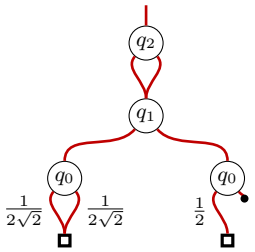


(22)

决策图的每一层都由决策节点构成，每个节点都有对应的左、右后继边。这些后继边表示通往某个振幅的路径，其中局部量子系统（对应于节点的层级，此处以标签标注）处于 $|0\rangle$（左后继）或 $|1\rangle$ 量子态（右后继）。

到目前为止，这只是将态矢量一对一地转换成一种精巧的图形表示。决策图的核心独特之处在于，其图结构允许在表示中合并冗余部分，而不必反复表示它们。

示例 6. 请注意，在前一个示例中，顶层（q_0）节点的左、右后继恰好指向相同的结构。因此，整个子图无需表示两次，即：



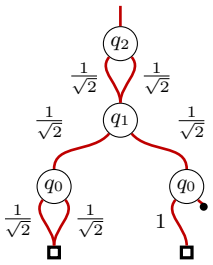
(23)

从内存角度来看，仅这一简化就使表示该量子态所需的总内存减少了 *50%*。

在这类表示中识别冗余，很大程度上取决于是否对决策图节点采用归一化方案 [46]。这种归一化方案确保表示相同功能的两个决策图节点确实具有相同的数值结构。在计算机科学中，这一性质称为规范性 [46]。

最常用且最具实际意义的归一化方案是：将节点的两条出边权重同时除以包含这两个边权重的向量的范数，从而对出边进行归一化，并相应地调整入边 [47]。这样可将出边权重的模的平方之和归一化为 1，且符合量子语义：测量后观测到基态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$的概率，分别等于相应权重的模的平方。归一化以自底向上的方式递归应用，以确保将所有可能的冗余都考虑在内。

示例 7. 考虑前一个示例中的决策图，可得到如下归一化且约简后的决策图：



(24)

上图的前两个层级（q_2 *and* q_1）自然地编码了相应位点处于 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$的概率分别为 $50/50$ （$|1/\sqrt{2}|^2 = 0.5$）。同时，底层级（q_0）编码了 q_0 的概率取决于q_1的量子态。如果 q_1 处于 $|0\rangle$ 量子态（沿左侧后继节点），那么在 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$中，q_0 的概率均为0.5 。如果 q_1 处于 $|1\rangle$量子态（沿右侧后继节点），则可以确定剩余位点处于 $|0\rangle$ 量子态。

总体而言，态矢量以决策图表示，其概念上等同于递归地将向量不断二分，直至完全分解。关键思想是利用所得图中的冗余，构建更紧凑的表示。以下是一些值得指出的有趣性质：

- 决策图可以直接以紧凑形式初始化（例如示例 7 所示）。在计算的任何阶段，都无需创建规模最大的决策图（例如示例 5 所示），也无需直接使用态矢量表示。

- 确定所表示量子态的某个振幅，相当于沿着从决策图顶端的边（称为其根节点）到终端节点的单路径遍历，将沿途的边权重相乘。
- 决策图的效率通常通过其大小来衡量，即决策图中的节点数量——节点数量越少，数据结构实现的压缩程度越高。需要注意的是，终端节点通常不计入决策图的大小。

- 任何乘积态都自然对应一个决策图，其中每个位点有一个节点。GHZ态或W态等高度冗余的量子态，其决策图的大小（即节点数量）也与位点数量呈线性关系。然而，紧凑的决策图并不意味着该量子态是平凡的。

- 决策图并非“万能良方”。对于不具有冗余的量子态，决策图的最坏情况大小仍然关于位点数量呈指数增长。更具体地说，对于 L 个位点，最大规模的决策图包含 $1 + 2^1 + 2^2 + \cdots + 2^{L-1} = 2^L - 1$ 个节点。
- 在实现中，复数边权重中的冗余等同于在一定容差范围内比较浮点数。

- 为减少决策图示意图中的视觉杂乱，通常不会明确标注边权重，而是通过相应边的粗细和颜色反映其模和相位。

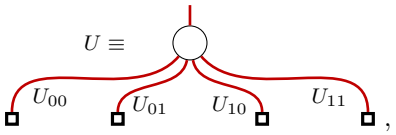
此外，为了更明确地体现决策图各层与系统位点之间的对应关系，节点通常会标注位点索引作为标识符。有关决策图常见可视化技术的更多详情，请参见 [48]。

B. 表示量子算符

量子算符本质上由（复数值）矩阵描述。就像在张量网络领域中，从矩阵乘积态 （MPS）表示转向矩阵乘积算符 （MPO）表示一样，矩阵决策图是向量决策图沿额外维度自然扩展的结果。为此，考虑一个 2×2 矩阵 U 的基本情形，即：

$$\begin{aligned} U &= \begin{pmatrix} U_{00} & U_{01} \\ U_{10} & U_{11} \end{pmatrix} \\ &= U_{00}\left|0\right\rangle\!\left\langle 0\right| + U_{01}\left|1\right\rangle\!\left\langle 0\right| + U_{10}\left|0\right\rangle\!\left\langle 1\right| + U_{11}\left|1\right\rangle\!\left\langle 1\right|. \end{aligned} \tag{25}$$

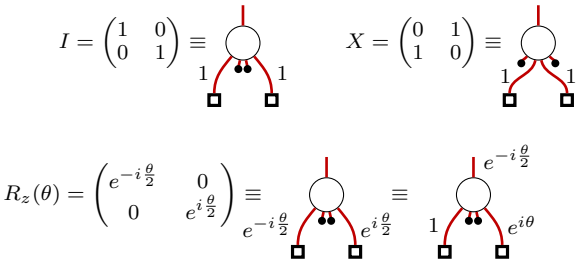
那么，表示该矩阵的决策图具有如下结构：



(26)

这同样与矩阵的一般结构相似。注意， U_{ij} 可以解释为将 $|j\rangle$ 变换为 $|i\rangle$。

例 8. 以下展示了若干选定单量子比特操作的决策图表示：



(27)

最后一个等价关系说明，边权重之间的公因子可以提取出来，并附加到输入（根节点）边上。

扩展到更大的矩阵，其方式与向量情况类似。要构造表示矩阵的决策图，会递归地将矩阵划分为四个象限，这四个部分分别对应表示该划分的节点的四个后继节点。与向量决策图一样，还会应用归一化方案，以确保生成的数据结构具有规范形式，并能利用冗余。常见做法是用模最大的边权重对所有边权重进行归一化；如果有多个权重的模相同，则选取最左侧的权重。需要注意的是，这样可以确保决策图中的所有复数的模都不超过 1，不过这取决于具体实现。

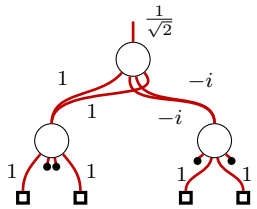
例 9. 考虑由矩阵表示的最大纠缠双量子比特R_{xx} 旋转。

$$R_{xx}\left(\theta=\frac{\pi}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & -i & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{28}$$

该矩阵等价于由 2×2 个矩阵组成的分块，分别对应单位算符 I 和 *Pauli-X* 矩阵，即：

$$R_{xx}\left(\theta=\frac{\pi}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} I & -iX \\ -iX & I \end{pmatrix}. \tag{29}$$

相应的（已约简）决策图具有以下结构：



(30)

注意，决策图自然呈现出与矩阵相似的结构。底部的节点表示单位算符和 X 矩阵（参见式（*27*）），而顶部的节点则编码了式（*29*）中左上与右下象限之间，以及右上与左下象限之间的冗余。与示例 *6* 类似，利用冗余使总内存需求减少了一半。

此外，还有一些值得指出的有趣性质：

- 与向量的情况一样，可以直接使用约简后的矩阵决策图形式，也就是说，无需构造规模呈指数增长的最大规模决策图。
- 对于一个 L位点的二能级系统，最大规模的矩阵决策图有 $\sum_{i=1}^{L} 4^{i-1} = \frac{1}{3}(4^L-1)$ 个节点，每个节点最多有 4 个标量边权重，其数量由稀疏性决定，即由零短枝的数量决定。
- 决策图并不局限于局部相互作用。即使是任意位点之间的长程相互作用，通常也能生成紧凑的决策图表示。例如，任意位点之间的双位点相互作用都可以表示为至多包含 $1+4(L-1)$ 个节点的决策图，实现指数级压缩。
- 决策图也不限于双量子比特相互作用。例如，具有任意多个控制位的受控量子门（如多重受控 Toffoli 门）会产生节点数量呈线性增长的决策图。

C. 决策图上的基本操作

仅仅定义用于紧凑表示任意类型量子态或算符的方法，还不足以实现哈密顿量模拟。定义高效的方法来处理或操纵所得表示同样至关重要。接下来，我们将展示如何在决策图形式体系中执行哈密顿量模拟最基本的操作，以及这些操作的扩展性如何。我们将主要关注如何实现各项操作。

向量，因为这些概念可以以直接明了的方式从向量扩展到矩阵。

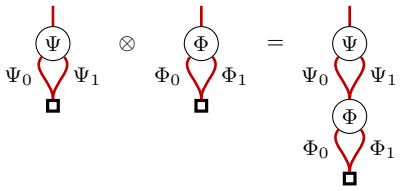
这些方案的核心概念都是递归地将相应操作分解为子计算。这样的分解自然会转化为决策图的递归分解。因此，操作的复杂度通常随所涉及决策图中的节点数量而增长。

克罗内克积

克罗内克积是构造乘积态以及将局部操作串接起来所必需的。对于向量，它可以表示为

$$|\Psi\rangle \otimes |\Phi\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_0 |\Phi\rangle \\ \Psi_1 |\Phi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_0 \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \end{pmatrix} \\ \Psi_1 \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}. \tag{31}$$

在决策图形式体系中，这是最简单的操作之一，只需将第一个决策图的终端节点替换为第二个决策图的根节点即可完成。对于上面的示例，其形式如下：



(32)

因此，其复杂度与第一个决策图中的节点数量呈线性关系。

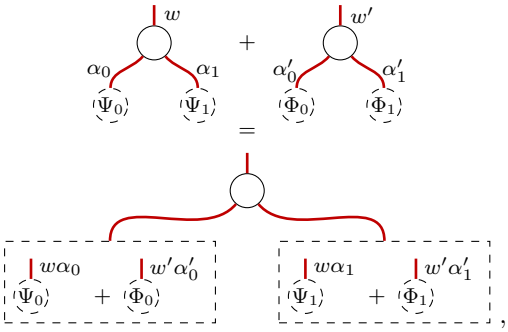
加法

标准向量加法可以递归地分解为

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle + |\Phi\rangle &= \begin{pmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \end{pmatrix} \\ &= w \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} + w' \begin{pmatrix} \alpha'_0 \\ \alpha'_1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} w\alpha_0 + w'\alpha'_0 \\ w\alpha_1 + w'\alpha'_1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{33}$$

其中， w 和 w' 分别是 $|\Psi\rangle$ 和$|\Phi\rangle$中各项的公因子。

在决策图形式体系中，这对应于同时从两个决策图的根节点遍历至终端（沿途将边权重相乘，直到到达各个振幅），然后再返回（累积递归计算的结果）。更确切地说，



(34)

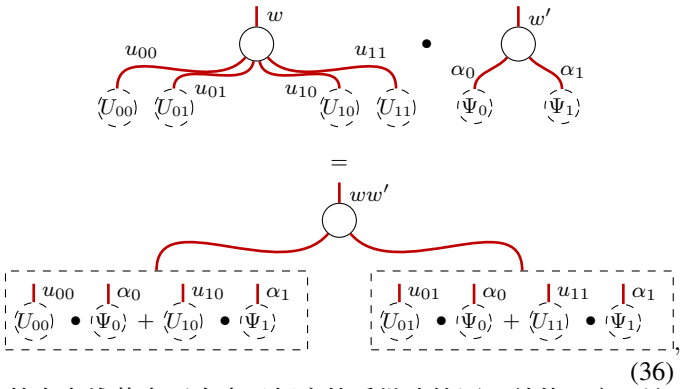
其中，虚线节点表示相应的后继决策图。总体而言，这使得复杂度与较大决策图的规模呈线性关系。

矩阵-向量乘法

矩阵-向量乘法的处理方式与加法非常相似。标准矩阵-向量乘法可以表示为

$$\begin{aligned} U|\Psi\rangle &= \begin{pmatrix} U_{00} & U_{01} \\ U_{10} & U_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1 \end{pmatrix} \\ &= w \begin{pmatrix} u_{00} & u_{01} \\ u_{10} & u_{11} \end{pmatrix} w' \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} \\ &= ww' \begin{pmatrix} u_{00} \cdot \alpha_0 + u_{10} \cdot \alpha_1 \\ u_{01} \cdot \alpha_0 + u_{11} \cdot \alpha_1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{35}$$

这意味着一次乘法归结为四次较小的乘法和两次加法。在决策图形式体系中，其形式为



(36)

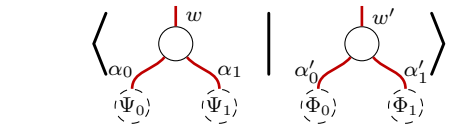
其中虚线节点再次表示相应的后继决策图。总体而言，这导致复杂度随两个决策图大小的乘积增长。

内积

两个向量的内积可以根据以下方式递归分解

$$\begin{aligned} \langle\Psi|\Phi\rangle &= \begin{pmatrix} \Psi_0^* & \Psi_1^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \end{pmatrix} \\ &= w^* \begin{pmatrix} \alpha_0^* & \alpha_1^* \end{pmatrix} w \begin{pmatrix} \alpha'_0 \\ \alpha'_1 \end{pmatrix} \\ &= w^* w (\alpha_0^* \alpha'_0 + \alpha_1^* \alpha'_0) \end{aligned} \tag{37}$$

这意味着，内积归结为两次规模更小的内积计算，并将结果相加。与矩阵-向量乘法一样，这一过程会针对决策图的每一层递归进行。在决策图形式体系中，其形式如下



$$= w^* w' \left(\left\langle \Psi_0 \middle| \Phi_0 \right\rangle + \left\langle \Psi_1 \middle| \Phi_1 \right\rangle \right), \tag{38}$$

总体而言，这使得复杂度与加法一样，随较大决策图的规模线性增长。

期望值

对于给定量子态 $|\Psi\rangle$，计算某个可观测量 O 的期望值可归约为如下矩阵-向量乘法和内积计算：

$$\langle \Psi | O | \Psi \rangle = \langle \Psi | \left(O | \Psi \rangle \right) = \langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle \tag{39}$$

这可通过公式 (36) 和公式 (38) 直接转换为决策图。所得计算的总体复杂度与两个决策图大小的乘积成比例。

V. 实验评估

利用上述介绍的概念，我们实现了首个基于决策图的哈密顿量模拟方法。为此，我们使用了开源的 DDSIM，网址为 https://github.com/cda-tum/mqt-ddsim（它是慕尼黑量子工具包（MQT）的一部分），并对其进行了扩展，使其支持所有必要的门（例如各种双量子比特旋转门）和操作（例如期望值）。随后，我们开展了多组评估与比较，以深入了解所得基于决策图的哈密顿量模拟的性能。更确切地说，我们首先分析了决策图本身的不同缩放特性，随后将其性能与其他最先进的技术进行比较，并考察了选定的最佳情况场景。在本节中，我们总结所获得的结果与发现。

A. 决策图在哈密顿量模拟电路中的应用

在第一系列评估中，我们首先分析了第 II-A 节所述的伊辛模型和海森堡模型的哈密顿量模拟电路中，决策图对各种旋转角度组合进行模拟时的行为。结果如图 1 所示。具体而言，我们生成了热图，称为冗余景观，展示了应用各电路后决策图中的节点数。我们针对系统规模为 $L = 12$ 且初始化为 $|0\ldots0\rangle$ 量子态的系统，分别进行了 $n = 1$ 和 $n = 2$ 个特罗特步的模拟。x 轴和 y 轴分别对应单点旋转和双点旋转的角度。

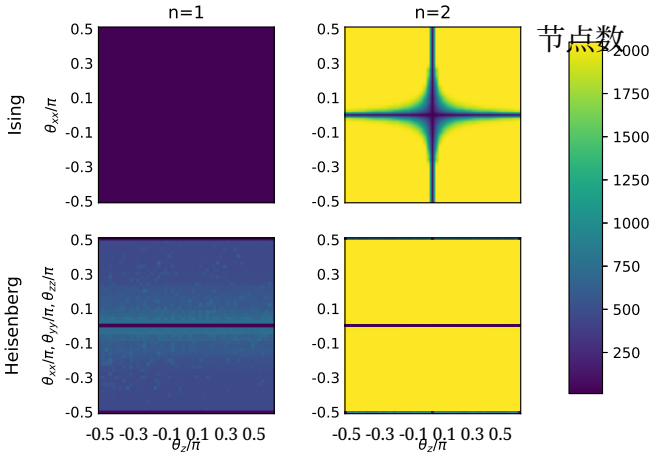


图 1. 伊辛模型和海森堡模型在选定角度下进行 $L = 12$ 次、 $n = 1$ 次和 $n = 2$ 次特罗特步应用时的冗余景观。

这些景观图以抽象的方式展示了角度的每种配置如何影响决策图的大小。通过使用基于伊辛和海森堡哈密顿量参数的广义角度，这些景观图还有助于识别能够生成紧凑决策图的模型参数和时间步长。

从结果可以看出，伊辛模型在进行一次特罗特步时，无论角度组合如何，都能保持紧凑，实现近乎最大的压缩。进行两次特罗特步时，景观开始饱和，因此对于较大的角度，几乎无法实现压缩。然而，对于较小的角度，即使进行多次特罗特步，规模仍然保持适中。

对于海森堡模型，单次特罗特步会产生比伊辛模型更大的决策图，但其规模仍未达到最大。然而，多次特罗特步会导致决策图的节点数随着角度的模迅速增长。

这表明，决策图很可能在伊辛模型及其衍生模型中保持紧凑，但要模拟海森堡模型仍需要开展更多工作。

B. 基于系统规模和特罗特步数的节点数

在第二轮评估中，我们考察了对不同系统规模应用不同特罗特步数时决策图中的节点数。伊辛模型和海森堡模型的结果如图2所示。图中，对规模从 $L = 2$ 到 $L = 10$ 的系统应用了多个特罗特步。电路角度固定不变，其取值依据上一节中观察到的冗余景观确定。图中所示伊辛模型的归一化相互作用参数为 $J = 1$，横向场较弱，为 $g = 0.001$。海森堡模型的相互作用参数为 $J_x = J_y = J_z = 1$，场强为 $h = 1$。两种情况下的时间步长均为 $\delta t = 0.1$。

从绘制的结果中可以得出一些见解。前几个特罗特步的初始斜率对缩放的影响最大，两种模型的节点数均达到 2^{L-1} 的最大值。

节点数缩放在两张图中均已归一化——从最大程度的压缩（深蓝色；线性区间）到几乎没有压缩（黄色；指数区间）。

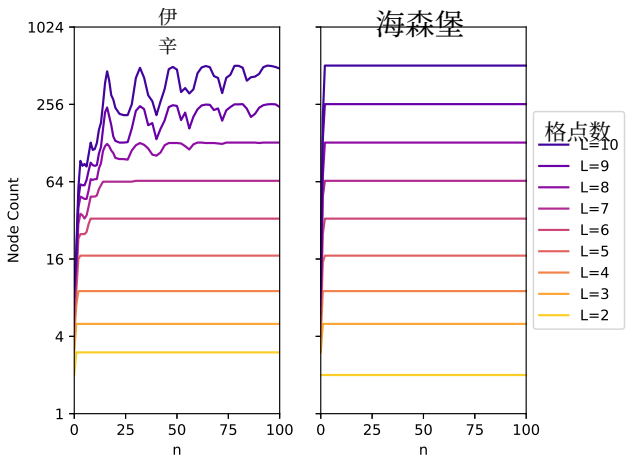


图2. 伊辛模型（$J = 1$, $g = 0.001$）和海森堡模型（$J_x = J_y = J_z = 1$, $h = 1$）的决策图节点数随时间步长 $\delta t = 0.1$ 的增长情况。

伊辛模型的节点数呈现振荡，对应于量子态比其他时刻更冗余的时刻。随着系统规模增大，这种振荡幅度也随之增大，表明规模更大的系统具有更多冗余，也有更多实现显著压缩的机会。随着特罗特步数增加，这种振荡的上下界逐渐趋于一致。

相比之下，海森堡模型仅经过两个特罗特步，节点数便收敛至最大值，这与冗余景观中显示的增长情况一致。在这一时间尺度下，所选海森堡模型参数在其决策图表示中并未呈现出太多冗余。

这些结果再次表明，伊辛模型在较长时间尺度下能够受益于显著压缩，尤其是对于大型系统。其节点数的振荡也说明，有必要精心设计冗余，以最大限度地发挥决策图的优势。另一方面，海森堡模型并未呈现出太多冗余。

C. 与相关工作的比较

在第三组评估中，我们比较了所提出的基于决策图的哈密顿量模拟与其他模拟方法的运行时间缩放情况。具体而言，我们将其与使用 SciPy 实现的稀疏方法进行精确计算所需的时间 [35]，、Qiskit 态矢量模拟器所需的时间 [8]，以及 tenpy 的时间演化块解耦（TEBD）实现所需的时间 [49]进行比较。结果如图 3 所示。每幅图展示了各方法执行时间演化并计算系统中心处局域可观测量 $\langle \sigma_z \rangle$ 的期望值所需的时间。结果取自 10 次运行的平均值。计算采用参数为 $J = 1$、$g = 0.001$ 且时间步长为 $\delta t = 0.1$ 的伊辛模型；不过，其他参数组合也呈现类似结果，因此这些结果可视为一般性参考。

结果表明，对于单个特罗特步，无论系统规模如何，决策图的性能均优于 Qiskit 态矢量模拟器和 tenpy TEBD。然而，随着特罗特步数的增加，决策图在较大系统中的优势逐渐减弱。我们注意到，运行时间开始与稀疏方法趋于一致。这些发现表明，对于能够通过单个特罗特步解决的问题，决策图最具优势。对于多个特罗特步，决策图在小规模系统中仍然具有计算优势，但在最坏情况下，运行时间会趋于稀疏方法计算精确结果所需的时间。

这些结果表明，决策图确实可以作为当前哈密顿量模拟方法的补充替代方案。由于这些结果基于当前最先进的决策图实现，因此预计未来的工作将改善其在许多特罗特步数及不同模型下的缩放表现。

D. 精选示例

在最后一系列评估中，我们考察了所考虑的基于决策图的哈密顿量模拟目前表现最佳的情形，即一个5位点伊辛模型，以及一个无外场的1000位点最近邻（Edwards-Anderson）自旋玻璃链。这些情形分别对应第V-C节中的结果：无论特罗特步数多少的小型系统，以及可通过单个特罗特步求解的问题。

5位点伊辛模型的结果见图4a。我们展示了5位点链 $\langle \sigma_x^{[0]} \sigma_x^{[4]} \rangle$两端之间两位点关联函数的时间演化，该链在参数为 $J = 1$、 $g = 0.001$的伊辛模型作用下演化。该图包含100个采样点，每个点均采用时间步长为 $\delta t = 0.1$的特罗特分解，即 $Jt = 0.1$ 需要1个特罗特步，而$Jt = 10$ 需要100个特罗特步。运行时间图清楚地表明，对于这一规模的系统，决策图的表现比通常采用的方法快一个数量级。

图 4b 展示了自旋玻璃模型的结果。该模型在一个方向上具有伊辛相互作用，且不存在外场。这等价于公式（8）中介绍的广义伊辛模型，其中参数 J 从均值为 0、标准差为 1 的高斯分布中随机选取。这意味着哈密顿量的各项彼此对易，从而消除了公式（4）中的 Trotter 误差。图中绘制了链中心处局域可观测量 $\langle \sigma_z^{[499]} \rangle$ 的时间演化，使用了 100 个采样点，时间步长为 $\delta t = 0.1$。每个点均通过单个特罗特步计算得到。

对于此规模的系统，张量网络目前是最先进的方法，因为稀疏方法和态矢量模拟器的规模增长过大，难以高效使用。在这个示例中，我们还可以看到，决策图的性能比张量网络高出一个数量级。

这些结果表明，当前决策图实现相较于其他方法具有显著的计算优势，不仅适用于小型系统，也适用于能够通过一个特罗特步求解的问题。

VI. 结论

在本研究中，我们提出了决策图 （DDs），将其作为一种用于哈密顿量模拟的有前景的新型数据结构。所得结果表明，决策图能够高效处理高度冗余的模型，例如伊辛型模型，在内存和运行时间需求方面优于态矢量模拟器和张量网络。对于可通过单个特罗特步求解的问题，决策图能够高效扩展至大型系统；而对于多个

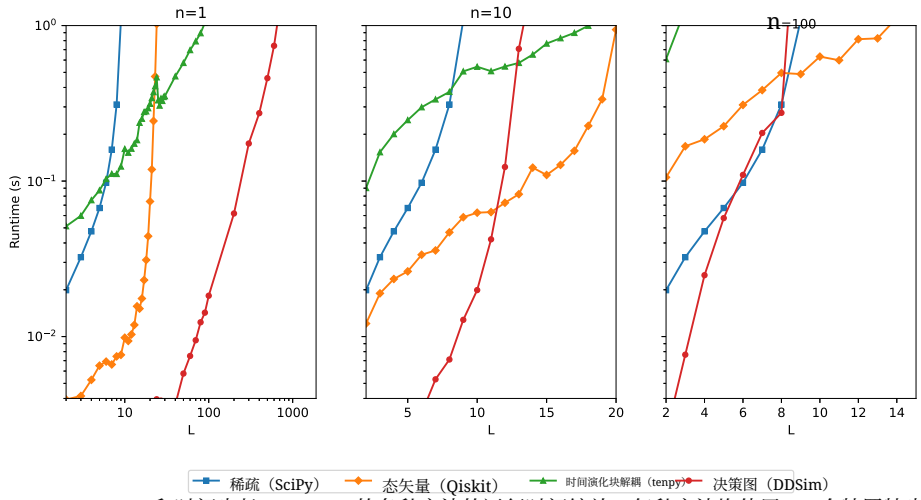
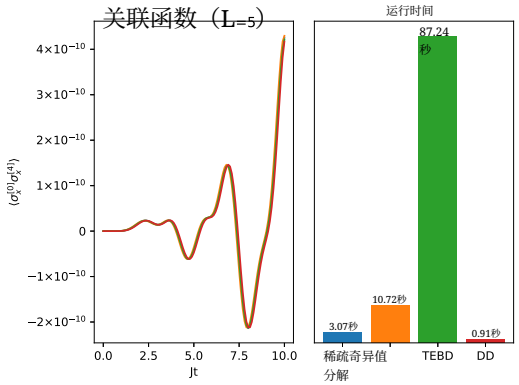
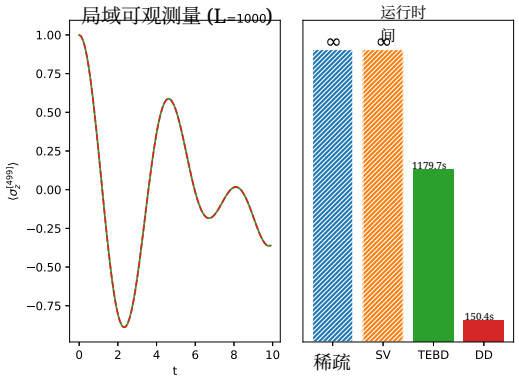


图 3. 模拟伊辛模型 $J = 1$, $g = 0.001$ 和时间步长 $\delta t = 0.1$ 的各种方法的运行时间缩放。每种方法均使用 n 个特罗特步进行计算。



(a) 伊辛模型下链两端两位点关联函数的时间演化， $J = 1$ $g = 0.001$ 适用于 $L = 5$ 个位点



(b) 均值为 0、标准差为 1 的高斯分布相互作用参数下，爱德华兹-安德森自旋玻璃模型的时间演化 J

图 4. 精选示例及不同方法所需的运行时间

特罗特步，决策图在小型系统上优于其他方法。随着特罗特步数增加，决策图最终会达到与稀疏方法相当的运行时间需求。不过，我们对更复杂模型（例如海森堡模型）的分析表明，这些模型的结果并不那么理想，这可能是由于其较低的水平的冗余。还需要进一步研究，以探索决策图在更复杂模型中的潜力。

尽管如此，这些初步结果已表明，对于可表述为伊辛模型的问题（例如二次无约束二元优化问题和图问题），决策图可能大有可为。此外，将决策图初步应用于长程模型和高维模型也展现出良好前景，尽管这些模型存在当前决策图形式体系尚未捕捉到的冗余。因此，未来研究可进一步探索这些高维模型，并设法在问题表述中构造冗余，以确保决策图保持紧凑。

我们也承认，决策图的局限性与当前最先进方法的局限性存在根本差异；要充分发挥其优势，需要转变视角。将决策图用于哈密顿量模拟，带来了运用图论领域技术的可能性，或许能够实现复杂的近似技术，从而改进缩放特性。开发近似方法，并探索在问题表述中构造冗余的途径，是决策图未来发展的一个有前景的方向，留待后续研究。

总之，本研究表明，决策图为哈密顿量模拟提供了一种前景广阔的新型数据结构，尤其适用于在建模时考虑冗余的问题。未来的研究可以着重改进决策图的实现，并探索其在更复杂模型和问题中的应用。我们预计，决策图将继续在高效、精确的模拟方法的发展中发挥重要作用。

致谢

本研究获得了欧盟地平线2020研究与创新计划下欧洲研究委员会（ERC）的资助（资助协议编号：101001318），是慕尼黑量子谷项目的一部分。该项目由巴伐利亚州政府使用巴伐利亚高科技议程Plus资金提供支持；此外，本研究还通过QuaST项目获得了联邦经济和气候保护部（BMWK）的资助，该资助依据德国联邦议院的一项决议提供。

参考文献

[1] J. Ignacio Cirac 和 Peter Zoller，“量子模拟的目标与机遇”，英文，*NaturePhysics*，第 8 卷，第 4 期，第 264–266 页，2012 年，期号：4，出版方：Nature Publishing Group。DOI：10.1038/nphys2275。[2] Richard P. Feynman，“用计算机模拟物理”，英文，*InternationalJournal ofTheoretical Physics*，第 21 卷，第 6 期，第 467–488 页，1982 年。DOI：10 . 1007 / BF02650179。[3] I. M. Georgescu、S. Ashhab 和 Franco Nori，“量子模拟”，*Reviews of Modern Physics*，第 86 卷，第 1 期，第 153–185 页，2014 年，出版方：美国物理学会。DOI：10.1103/RevModPhys.86.153。[4] Andrew J. Daley 等，“量子模拟中的实用量子优势”，英文，*Nature*，第 607 卷，第 7920 期，第 667–676 页，2022 年，期号：7920，出版方：Nature Publishing Group。DOI：10.1038/s41586-022-04940-6。[5] Andrew Lucas，“许多 NP 问题的伊辛表述”，*Frontiers inPhysics*，第 2 卷，2014 年。DOI：10.3389/ fphy.2014.00005。[6] Zhidong Zhang，“自旋玻璃三维（3D）伊辛模型与布尔可满足性问题之间的映射”，英文，*Mathematics*，第 11 卷，第 1 期，第 237 页，2023 年，期号：1，出版方：Multidisciplinary Digital Publishing Institute。DOI：10.3390/math11010237。[7] Hannes Leipold 和 Federico M. Spedalieri，“为带线性约束的优化问题构造驱动哈密顿量”，英文，*Quantum Science and Technology*，第 7 卷，第 1 期，第 015013 页，2021 年，出版方：IOP Publishing。DOI：10.1088/2058-9565/ac16b8。[8] Qiskit 贡献者，*Qiskit*：用于量子计算的开源框架，2023 年。DOI：10.5281/zenodo. 2573505。[9] Ville Bergholm 等 “ PennyLane：混合量子-经典计算的自动微分。” arXiv：arXiv:1811.04968。（2022），预印本。[10] *Cirq*：一个用于创建、编辑和调用含噪中等规模量子（*NISQ*）电路的 *Python* 框架。 [在线]。可访问：https : / / github . com / quantumlib/Cirq。[11] Román Orús，“复杂量子系统的张量网络”，英文，*NatureReviews Physics*，第 1 卷，第 9 期，第 538–550 页，2019 年，期号：9，出版方：Nature Publishing Group。DOI：10.1038/s42254-019-0086-7。[12] Jacob C. Bridgeman 和 Christopher T. Chubb，“挥手与诠释性舞蹈：张量网络入门课程”，英文，*Journal ofPhysicsA: Mathematical andTheoretical*，第 50 卷，第 22 期，第 223001 页，2017 年，arXiv:1603。03039 [凝聚态物理，物理学：高能物理理论，物理学：量子物理]。DOI：10.1088/1751-8121/aa6dc3。[13] Giuseppe Carleo 和 Matthias Troyer，“利用人工神经网络求解量子多体问题”，*Science*，第 355 卷，第 6325 期，第 602–606 页，2017 年。DOI：10.1126/science.aag2302。[14] Markus Schmitt 和 Markus Heyl，“利用人工神经网络研究二维量子多体动力学”，*Physical ReviewLetters*，第 125 卷，第 10 期，第100页503，2020。DOI：10 . 1103 / PhysRevLett . 125 . 100503。[15] Irene López Gutiérrez 和 Christian B. Mendl，“神经网络量子态的实时演化”，*Quantum*，第6卷，第627页，2022。DOI：10.22331/q-2022- 01-20-627。[16] Xiaosi Xu等，一项艰巨任务：量子计算机的经典模拟，arXiv:2302.08880 [quant-ph],2023。DOI：10.48550/arXiv.2302.08880。[17] Yiqing Zhou、E. Miles Stoudenmire 和 Xavier Wain- tal，“什么限制了量子计算机的模拟？”*Physical Review X*，第10卷，第4期，第041 038页，2020，出版方：美国物理学会。DOI：10.1103/PhysRevX.10.041038。[18] S. Minato，“用于组合问题中集合操作的零抑制二叉决策图”，载于设计自动化会议，1993，第272–277页。[19] Tom van Dijk、Robert Wille 和 Robert Meolic，“带标签二叉决策图：结合不同决策图类型的约简规则”，载于*2017*年计算机辅助设计形式化方法会议（*FMCAD*），2017，第108–115页。DOI：10.23919/FMCAD.2017.8102248。[20] Thomas Grurl、Jürgen Fuß 和 Robert Wille，“基于决策图的噪声感知量子电路模拟”，*IEEE*集成电路与系统计算机辅助设计汇刊，第42卷，第3期，第860–873页，2023，会议名称：IEEE集成电路与系统计算机辅助设计汇刊。DOI：10.1109/TCAD.2022.3182628。[21] Alwin Zulehner 和 Robert Wille，“量子计算的高级模拟”，*IEEE*集成电路与系统计算机辅助设计汇刊，2019。[22] A. Zulehner 和 R. Wille，“可逆电路的单遍设计：结合嵌入与综合实现可逆逻辑”，*IEEE*集成电路与系统计算机辅助设计汇刊，第37卷，第5期，第996–1008页，2018。[23] Mehdi Saeedi、Robert Wille 和 Rolf Drechsler，“面向线性最近邻架构的量子电路综合”，量子信息处理，第10卷，第3期，第355–377页，2011。DOI：10.1007/s11128-010- 0201-2。arXiv：1110.6412。[24] Philipp Niemann、Robert Wille 和 Rolf Drechsler，“实现克利福德群操作的量子电路的高效综合”，载于亚洲及南太平洋设计自动化会议，2014，第483–488页。[25] Lukas Burgholzer 和 Robert Wille，“量子电路的高级等价性检查”，*IEEE*集成电路与系统计算机辅助设计汇刊，2021。[26] Stefan Hillmich等，“浅层电路量子测量的决策图”，载于*2021*年*IEEE*量子计算与工程国际会议（*QCE*），arXiv:2105.06932 [quant-ph],2021，第24–34页。DOI：10.1109/QCE52317.2021.00018。[27] Seth Lloyd，“通用量子模拟器”，*Science*，第273卷，第5278期，第1073–1078页，1996。DOI：10.1126/science.273.5278.1073。[28] Naomichi Hatano 和 Masuo Suzuki，“寻找更高阶的指数乘积公式”，载于量子退火及其他优化方法，

第679卷，施普林格柏林海德堡，2005，第37–68页。DOI：10.1007/11526216 2。[29] Andrew M. Childs等，“具有对易子标度的 Trotter 误差理论”，*PhysicalReview X*，第11卷，第1期，第011 020页，2021。DOI：10.1103/PhysRevX.11.011020。[30] D.J. Griffiths，量子力学导论。培生普伦蒂斯霍尔，2005。[31] W. Heisenberg，“论铁磁性的理论”，德文，《物理学杂志》，第49卷，第9期，第619–636页，1928。DOI：10.1007/BF01328601。[32] David Sherrington，“神经网络：自旋玻璃方法”，英文，载于北荷兰数学图书馆，第51卷，爱思唯尔，1993，第261–291页。DOI：10 . 1016 / S0924-6509(08)70040-0。[33] Roman Martonak、Giuseppe E. Santoro 和 Erio Tosatti，“旅行商问题的量子退火”，《物理评论 *E*》，第70卷，第5期，第057 701页，2004，arXiv:cond-mat/0402330。DOI：10 . 1103/PhysRevE.70.057701。[34] Dominic W. Berry等，“用于模拟稀疏哈密顿量的高效量子算法”，英文，数学物理通讯，第270卷，第2期，第359–371页，2007。DOI：10.1007/s00220-006-0150-x。[35] Pauli Virtanen等，“SciPy 1.0：Python科学计算的基础算法”，《自然·方法》，第17卷，第261–272页，2020。DOI：10 .1038 / s41592-019-0686-2。[36] M. B. Hastings，“一维量子系统的面积定律”，统计力学杂志：理论与实验，第2007卷，第08期，P08024–P08024，2007，arXiv:0705.2024 [cond-mat, physics:math-ph, physics:quant-ph]。DOI：10 . 1088 / 1742-5468/2007/08/P08024。[37] Guifré Vidal，“对轻度纠缠量子计算的高效经典模拟”，《物理评论快报》，第91卷，第147 902页，2003年14日。DOI：10 . 1103 / PhysRevLett.91.147902。[38] Johnnie Gray 和 Stefanos Kourtis，“超优化张量网络收缩”，*Quantum*，第5卷，第410页，2021。[39] Cupjin Huang等，“用于模拟量子计算的张量网络收缩高效并行化”，英文，《自然·计算科学》，第1卷，第9期，第578–587页，2021年，第9期。出版商：Nature Publishing Group。DOI：10.1038/s43588-021-00119-7.[40] Reza Haghshenas，《酉张量网络电路的优化方案》，英文，*PhysicalReview Research*，第3卷，第2期，文章编号023 148，2021年，arXiv:2009.02606 [cond-mat, physics:quant-ph]。DOI：10.1103/PhysRevResearch.3.023148.[41] Frank Schindler 和 Adam S. Jermyn，《张量网络收缩顺序的算法》，英文，*MachineLearning: Science andTechnology*，第1卷，第3期，文章编号035 001，2020年，出版商：IOP Publishing。DOI：10.1088/2632-2153/ab94c5.[42] Eli A. Meirom 等，《利用强化学习优化张量网络收缩》，arXiv:2204.09052 [quant-ph]，2022。DOI：10.48550/arXiv.2204.09052.[43] Ulrich Schollwöck，《矩阵乘积态时代的密度矩阵重整化群》，*Annalsof Physics*，第326卷，第1期，第96–192页，2011年。DOI：10.1016/j.aop.2010.09.012.[44] Jutho Haegeman 等，《量子晶格的时间依赖变分原理》，*Physical Review Letters*，第107卷，第7期，文章编号070 601，2011年。DOI：10.1103/PhysRevLett.107.070601.[45] Sheng-Hsuan Lin 和 Frank Pollmann，《神经网络量子态在时间演化中的缩放》，*Physica Status Solidi (b)*，第259卷，第5期，文章编号2 100 172，2022年。DOI：10.1002/pssb.202100172.[46] Philipp Niemann等，《QMDDs：高效的量子函数表示与操作》，*IEEE*集成电路与系统计算机辅助设计汇刊，2016年。[47] Stefan Hillmich、Igor L. Markov 和 Robert Wille，《与真实计算如出一辙：量子计算的快速弱模拟》，载于设计自动化会议，2020年。[48] Robert Wille、Lukas Burgholzer 和 Michael Artner，《量子计算中决策图的可视化》，载于欧洲设计、自动化与测试会议，2021年。[49] Johannes Hauschild 和 Frank Pollmann，《利用张量网络进行高效数值模拟：张量网络 Python（TeNPy）》，*SciPost Phys. Lect. Notes*，第5页，2018年。代码可通过 https://github.com/tenpy/tenpy 获取。DOI：10.21468/SciPostPhysLectNotes.5。arXiv：1805.00055。