TIMES-ADAPT：一种利用固定深度量子线路在低能子空间中实现实时演化的量子算法

Bharath Sambasivam ,[1,2,*] Kyle Sherbert ,[1,3,2] Karunya Shirali ,[1,2] Nicholas J. Mayhall ,[3,2] Edwin Barnes ,[1,2] 和 Sophia E. Economou [1,2,†] [1] *Department of Physics, Virginia Tech, Blacksburg, VA 24061, USA* [2] *Virginia Tech Center for Quantum Information Science and Engineering, Blacksburg, VA 24061, USA* [3] *Department of Chemistry, Virginia Tech, Blacksburg, VA 24061, USA*（日期：2026年3月4日）

我们提出一种新的变分量子算法，称为 TIMES-ADAPT，可在量子计算机上制备时间无关哈密顿量的低能子空间或对称子空间中的时间演化态。我们利用经过专门训练、可在子空间中对角化哈密顿量的酉算子，构造用于子空间实时演化的固定深度电路，其中时间仅作为电路参数。根据初始态是在能量本征基还是计算基中指定，我们提出该算法的两个版本。我们探讨该方法的两项重要应用：波包演化和自旋系统中的能量输运。我们使用海森堡XXZ模型的变体对算法进行基准测试。

arXiv:2603.02305v1 [quant-ph] 2 Mar 2026

I. 引言

模拟哈密顿量的实时动力学有广泛的重要应用，包括研究化学反应 [1–3]，自旋系统中的散射 [4, 5]和高能物理 [6–10]，多体系统的热化 [11–13]，Floquet 系统的动力学 [14, 15]，探测量子混沌 [16–18]，以及研究材料中的热输运或能量输运 [19, 20]。使用经典技术来实现这些任务通常难以处理，因为存储并跟踪纠缠多体量子态的演化所需的成本呈指数增长。张量网络已成为研究实时演化的一种有效经典技术（综述见参考文献 [21]），但仅在较短时间内有效，此时系统中的纠缠还不太强。量子计算机为解决这一问题提供了自然途径，尤其适用于静态哈密顿量 [22]。

现有的实时哈密顿量模拟量子方法包括乘积公式 [23–29]，，其中包括针对低能初态改进误差界的方法 [30],酉算子线性组合 [31, 32]，量子随机游走 [33–35]，量子比特化 [36]，动力学李代数分解 [37, 38]，Krylov 子空间方法 [39–41]，以及变分方法 [42–50]。鉴于资源开销较低，低阶乘积公式和变分方法最适合在近期实现。然而，采用低截断阶数的乘积公式会产生误差，并且误差会在较晚时刻变得很大。Trotter化还会破坏哈密顿量对称性，因此会引入源自希尔伯特空间中与初始态不属于同一对称子空间部分的误差。现有采用受麦克拉克伦变分原理 [42, 51] 启发的代价函数的变分方法也需要对时间进行离散化以进行数值计算，从而引入随时间增长的误差。此外，采用静态 ans¨atz 的变分方法往往也会产生更深的量子电路，并面临优化问题。采用自适应构造 [44, 49, 50]可以在一定程度上缓解这些问题。在文献 [43, 47]，中，研究者考虑对输入态进行短时间的 Trotter 近似幺正演化，并通过变分对角化，以寻找与初始态有重叠的哈密顿量本征态。随后利用对角化幺正算符对初始态进行快进演化。由此得到的实际上是固定深度量子线路，其中时间作为量子线路参数。这种量子线路与精确演化相比，能够在更长时间内保持较高保真度。然而，起始阶段使用 Trotter 近似仍会引入误差，并且该误差最终会在长时间极限下变得显著。在文献 [41]，中，研究者使用具有多个参考态的 Krylov 子空间方法，对初始态的实时动力学进行快进演化。尽管如此，误差仍会随时间增长，因此需要更多参考态才能在较晚时刻保持较高保真度。涉及哈密顿量的动力学李代数分解的方法 [37] 能够得到真正固定深度的量子电路。然而，对于含相互作用费米子的系统，预计其资源需求会不利地增长 [38, 52]。

在这项工作中，我们提出了一种新的量子算法，称为 TIMES-ADAPT。该算法利用固定深度电路制备相对于时间无关哈密顿量演化任意长时间的态。我们首先训练一个参数化量子电路，使其在感兴趣的子空间内对角化哈密顿量。为此，我们采用模块化试探态，利用 TEPID-ADAPT 制备该哈密顿量的热吉布斯态，其中自由能是代价函数。TEPID-ADAPT 会产生低能本征值，以及一种基变换量子电路，可将计算基态映射到低能本征态——这些输出都是 TIMES-ADAPT 的关键组成部分。

* sbharath@vt.edu
† economou@vt.edu

在这项工作中，我们还将该方法扩展到对称性子空间：通过设计 ADAPT-VQE 子程序中使用的算符池，使其保持在感兴趣的对称子空间内。我们提出了两个版本的 TIMES-ADAPT，区别在于初始态是在能量本征基中还是在计算基中指定。两种情况下，TIMES-ADAPT 都能生成固定深度量子线路，其中时间作为参数出现在态制备步骤中。如果初始态完全处于通过 TEPID-ADAPT 找到的子空间内，那么误差唯一来源就是基变换酉算子的变分制备。由于完全避免了 Trotter化，TIMES-ADAPT 不会因时间增长而累积误差，并且能够完全避免破坏系统对称性。它也不会明显受到感兴趣系统的动力学李代数规模增长的限制。

我们在两个应用中展示了 TIMES-ADAPT：波包演化以及自旋系统中的能量输运。波包演化对于研究晶格模型中的散射至关重要，例如自旋系统和格点规范理论。利用我们的方法，可以使用固定深度电路研究对称性子空间中的波包演化。研究材料中的热输运和能量输运是非平衡统计物理学中的一个有趣问题，并对热化具有重要意义 [19, 20]。热扰动的晚期动力学行为有助于将系统归类为不同的普适类。扰动及其演化主要存在于低能扇区中，因此这是应用我们的固定深度算法的一个绝佳场景。

本文的结构如下。在第 II节中，我们回顾 TEPID-ADAPT [53]，将其作为在低能或对称子空间中对角化哈密顿量的一种方法。在第 III节中，我们介绍算法 TIMES-ADAPT，利用固定深度量子线路研究子空间中与时间无关哈密顿量的实时动力学。在第 IV节中，我们将 TIMES-ADAPT 应用于海森堡XXZ模型的铁磁相，并将结果与精确对角化进行比较。在第 V节中，我们总结全文并提出未来的研究方向。在附录 A中，我们介绍 TIMES-ADAPT 的两个应用：波包演化和能量输运。附录 B 和 C包含算法的更多细节。

II. TEPID-ADAPT回顾

在本节中，我们简要回顾TEPID-ADAPT [53]，即我们通过对低温吉布斯态的制备来对角化所关注的低能子空间的方法

$$\rho_G \equiv \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \qquad Z = \mathrm{Tr}\big(e^{-\beta H}\big), \tag{1}$$

其中 β 为逆温度。TEPID-ADAPT 使用图1所示的分块参数化试探态。

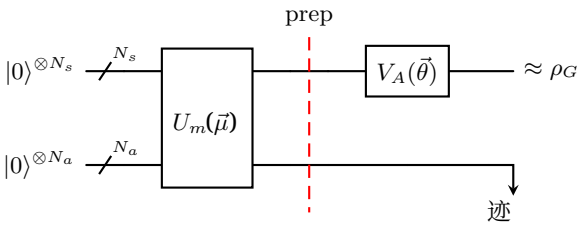

图1. TEPID-ADAPT变分拟设的总体框图。 $U_m(\vec{\mu})$在系统寄存器（上方）上制备 ρ_m ，如红线所示。 $V_A(\vec{\theta})$是系统寄存器上自适应生成的酉算子，它将 ρ_m 近似演化到目标吉布斯态。

以同时针对哈密顿量的 m 个低能本征态。试探态 $U_m(\vec{\mu})$ 的静态部分使用大小为 $N_a \geq \lceil \log_2 m \rceil$ 的辅助寄存器，以在系统寄存器上制备一个支撑于 m个计算基元素的参数化对角密度矩阵：

$$\rho_m = \sum_{k=1}^{m} \mu_k \left|c_k\right\rangle \left\langle c_k\right|, \tag{2}$$

其中， $\{|c_k\rangle\}_{k=1}^{m}$ 是所选的计算基态。收敛后，自适应生成的酉算子 V_A 将该计算基子空间映射到由 m 个低能本征态 $\{|\psi_k\rangle\}_{k\in\mathbf{S}}$张成的子空间$\mathbf{S}$：

$$V_A \equiv \sum_{k\in\mathbf{S}} \left|\psi_k\right\rangle \left\langle c_k\right| + V_\perp, \tag{3}$$

其中 $V_\perp$ 是一个湮灭计算基态 $\{|c_k\rangle\}_{k=1}^{m}$的算符。注意，式（ V_A $\{|c_k\rangle\}_{k=m+1}^{2_s^N}$ 3）中并未指定 [53],对m 的作用。在文献 H 中，目标子空间由 的绝对最低能量本征态张成，因为其目标是制备低温吉布斯态。在本研究中，我们考虑更一般的低能子空间 $\mathbf{S}$。例如，可以通过谨慎选择计算基态和池算符，来靶向属于某个对称子空间的本征态，并利用它们自适应地构建 V_A。在这种情况下，使用 TEPID-ADAPT 制备的态将是投影到该对称子空间上的哈密顿量的低温吉布斯态：

$$\rho_G \equiv \frac{e^{-\beta H_{\mathbf{S}}}}{Z_{\mathbf{S}}}, \qquad Z_{\mathbf{S}} = \mathrm{Tr}\big(e^{-\beta H_{\mathbf{S}}}\big), \tag{4}$$

其中 $H_{\mathbf{S}} = \mathbb{P}_{\mathbf{S}}\, H\, \mathbb{P}_{\mathbf{S}}$，其中 $\mathbb{P}_{\mathbf{S}}$ 是投影到对称子空间 $\mathbf{S}$ 上的投影算符。我们在附录 A中考虑这样一个例子，研究自旋系统单磁振子子空间中的本征态。

请注意，在本研究中，我们仅将使用 TEPID-ADAPT 制备吉布斯态作为一种手段，用于训练能够在所需低能子空间中对角化哈密顿量的量子线路。另一种做法是采用并发VQE [54] 等方法，同时瞄准多个低能本征态；然而，采用这种方法时，需要对每个本征态进行测量，才能

获得本征态之间的能量差。相比之下，使用 TEPID-ADAPT 可以省去这项额外开销，并根据用于制备吉布斯态的特定参数化方式和优化过程，直接从收敛后的参数中获得这些能量差：

$$\Delta E_k = \frac{1}{\beta}\log\frac{\mu_1}{\mu_k} \quad \forall\, k \in \mathbf{S}, \tag{5}$$

其中 $\Delta E_k \equiv E_k - E_1$。这些能量差决定了实时演化过程中各个本征态之间的相对相位。训练好自适应生成的酉算子 V_A后，我们便能使用固定深度电路，研究预先制备的低能子空间中任意态的实时动力学，详见第 III节。

III. TIMES-ADAPT

本节将介绍我们量子算法的两个相关版本，用于在量子计算机上模拟由定态哈密顿量支配的多体量子系统的实时动力学。我们将该算法统称为 TIMES-ADAPT，即**热**启发式**子空间**演化**方法**。**我们假设这些算法的输入是一个用于制备待演化初始态的量子线路，** $|\psi(0)\rangle$。我们用$\mathbf{S}$表示 TEPID-ADAPT 找到的子空间。如果初始态并非完全处于$\mathbf{S}$中，我们将在附录C中分析由此产生的误差。接下来，我们只处理系统寄存器——可丢弃用于制备热态的辅助寄存器。图2展示了 TIMES-ADAPT 两个版本的流程图。

A. TIMES-ADAPT-I

在 TIMES-ADAPT 的第一个版本中，我们称之为 TIMES-ADAPT-I，并假设初始态以截断本征基 $\{|\psi_k\rangle\}_{k\in\mathbf{S}}$ 表示：

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{k\in\mathbf{S}} \alpha_k\, |\psi_k\rangle\,. \tag{6}$$

如果系数 α_k 事先未知先验地，我们在附录 B1中提出了一种求解方法。首先，我们制备叠加态

$$|\chi(t)\rangle = \sum_{k\in\mathbf{S}} \alpha_k\, e^{-i\,E_k\,t}\,|c_k\rangle\,, \tag{7}$$

其中 $\{E_k\}_{k\in\mathbf{S}}$ 是 H 中$\mathbf{S}$对应本征态的能量，$\{|c_k\rangle\}_{k\in\mathbf{S}}$是我们用于制备吉布斯态的计算基元素，而$t$是我们希望演化到的时间。注意，式（7）中的整体相位可以提取出来，因此演化后的态仅取决于式（5）。该态制备的具体步骤见附录B。对于该态制备，我们假设$\sum_{k\in\mathbf{S}}|\alpha_k|^2 = 1$，也就是说，初始态 $|\psi(0)\rangle$ 完全位于子空间$\mathbf{S}$中。如果情况并非如此，则对 α_k 进行重新归一化，以确保 $|\chi(t)\rangle$ 是归一化态。本节末尾将讨论这种归一化所引入的误差。

接下来，我们对态 $|\chi(t)\rangle$施加酉算子 V_A ，得到

$$|\psi(t)\rangle \equiv V_A\,|\chi(t)\rangle = \sum_{k\in\mathbf{S}} \alpha_k\, e^{-i\,E_k\,t}\,|\psi_k\rangle\,. \tag{8}$$

这恰好就是在哈密顿量 H作用下，将初始态 $|\psi(0)\rangle$ 演化任意时间 t 后得到的态。我们采用了一个固定深度量子线路，其中先制备 $|\chi(t)\rangle$（见式（7））， 然后施加 V_A。

如果初始态 $|\psi(0)\rangle$ 并未完全处于 TEPID-ADAPT 找到的子空间中，那么演化态与精确对角化结果之间的保真度将是一个小于 1 的常数（与时间无关）。这是因为我们实际上是在演化 $|\psi(0)\rangle$ 在 TEPID-ADAPT 找到的子空间上的投影。投影后的态的范数不会随时间改变，因此保真度会恒定降低。我们在附录C中对此进行了详细说明。我们在第 IV 节展示了 TIMES-ADAPT-I 在反铁磁相中的海森堡 XXZ 模型上的应用。此外，我们还在附录A中展示了将 TIMES-ADAPT-I 用于演化波包的实例。

B. TIMES-ADAPT-II

我们称该算法的第二个版本为 TIMES-ADAPT-II。它直接在截断到相关低能子空间的哈密顿量作用下，演化一个以计算基指定的初始态。秩为 m的有效哈密顿量 H 的能谱为˜

$$\vec{\Lambda} = (E_1, \cdots, E_m, 0, \cdots, 0)\,, \tag{9}$$

其中， m能量与原始哈密顿量 H的能量相同，对应于处于所关注低能子空间中的本征态。由于 TEPID-ADAPT 所采用的截断˜方案，其余能量实际上为零。在截断本征空间中的向量上， $U(t)$ $=\exp\left(-i\,\tilde{H}\,t\right)$ 的作用与完整演化酉算子 $\exp\left(-i\,H\,t\right)$ 的作用相同。

˜为了编译 $U(t)$，我们首先构造一个一般的对角酉算子

$$D(t) \equiv \sum_{k=1}^{2^{N_s}} \exp(-i\,\Lambda_k\,t)\,|c_k\rangle\langle c_k| \tag{10}$$

来自施加于 N_s 系统量子比特的一系列 m多控制相位门。接下来，我们用

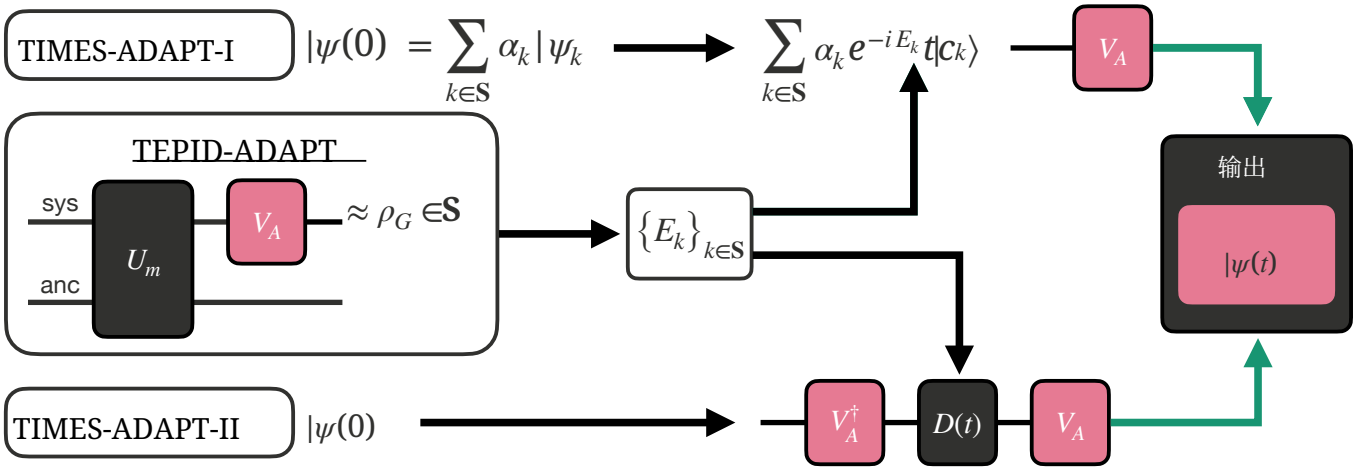

图2. TIMES-ADAPT的图示工作流程。我们首先使用TEPID-ADAPT训练一个自适应生成的量子线路V_A，以对角化低能子空间中的哈密顿量。我们也可以从该过程中直接获得能量差。我们提出了算法的两个相关版本，用固定深度量子线路对低能子空间中的态进行时间演化。在TIMES-ADAPT-I中，我们构造计算基态的特定线性组合，并使用 V_A 得到时间演化态 $|\psi(t)\rangle$。在TIMES-ADAPT-II中，我们编译一个与低能子空间中的演化算符等价的有效幺正算符，然后将其作用于初始态，得到时间演化态 $|\psi(t)\rangle$。

从TEPID-ADAPT得到的收敛基变换酉算子 V_A 进行共轭，以得到所需的有效演化酉算子：

$$\begin{aligned}\tilde{U}(t) &= V_A\, D(t)\, V_A^\dagger \\ &= \sum_{k=1}^{m} e^{-i\,E_k\,t}\,|\psi_k\rangle\langle\psi_k| + \sum_{k=m+1}^{2^{N_s}} |w_k\rangle\langle w_k|\,,\end{aligned} \tag{11}$$

其中 $|w_k\rangle \equiv V_\perp |c_k\rangle$，并且 $V_\perp$ 是在方程（3）中引入的。$\tilde{}$酉算符 $U(t)$ 可应用于任意初始态，而无需了解其在截断本征空间中的系数。请注意，只有当初始态完全位于低能子空**间 S**中时，结果才准确。如果初始态 $|\psi(0)\rangle$ 并未完全位于 **S**中，则演化态的保真度会以不属于 **S**的本征态能量所决定的频率振荡。我们在附录 C中展示了这一点。我们在第 IV 节中针对反铁磁相的海森堡XXZ模型展示了TIMES-ADAPT-II。我们还在附录 A中展示了将TIMES-ADAPT-II应用于能量输运动力学的情况。

IV. 数值结果

本节中，我们展示 TIMES- ADAPT 的两个版本，采用具有六个量子比特的海森堡 XXZ 模型的反铁磁相（$J_z > 1.0$），其哈密顿量描述如下：

$$H_{\mathrm{XXZ}}(J_z) = \sum_{k=1}^{5} \left(\sigma_k^x\sigma_{k+1}^x + \sigma_k^y\sigma_{k+1}^y + J_z\sigma_k^z\sigma_{k+1}^z\right), \tag{12}$$

其中，J_z 是 Z方向上的耦合，而 $\sigma^{x,\,y\,z}_{j}$，是作用于量子比特 j上的泡利算符。

我们使用TEPID-ADAPT自适应地训练量子线路，以找到酉算符 V_A，使其在由 H_{XXZ}(1.5) 的最低五个本征态张成的子空间中对角化哈密顿量。我们通过制备吉布斯态来实现这一目标，所用方法为 $\beta = 2.0$[1]。随后，我们考察同一低能子空间中各种态的实时演化。为了测试当初始态未完全位于该子空间中时TIMES-ADAPT的性能，我们考察基变换酉算符 V_A 在低维子空间中对 H_{XXZ}(1.5)进行对角化的情况。我们考虑若干由其在截断本征基中的系数定义的初始态：

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{k=1}^{5}\alpha_k\,|\psi_k\rangle\,. \tag{13}$$

在图3中，我们绘制了演化态的保真度（相对于精确对角化结果计算），该演化态是使用不同数目 m 个在TEPID-ADAPT 子程序中保留的低能本征态得到的。如图例所示，图3 中的虚线和实线分别对应于使用 TIMES-ADAPT-I 和 TIMES-ADAPT-II 的实时演化。插图展示了 H_{XXZ}(1.5) 的低能本征谱的样子。我们考虑三类初始态/系数：

[1]由于使用 TEPID-ADAPT 寻找固定数量的低能本征态时，秩截断吉布斯态的质量并不重要，因此温度是一个超参数，选择任意适中的温度都是合适的。

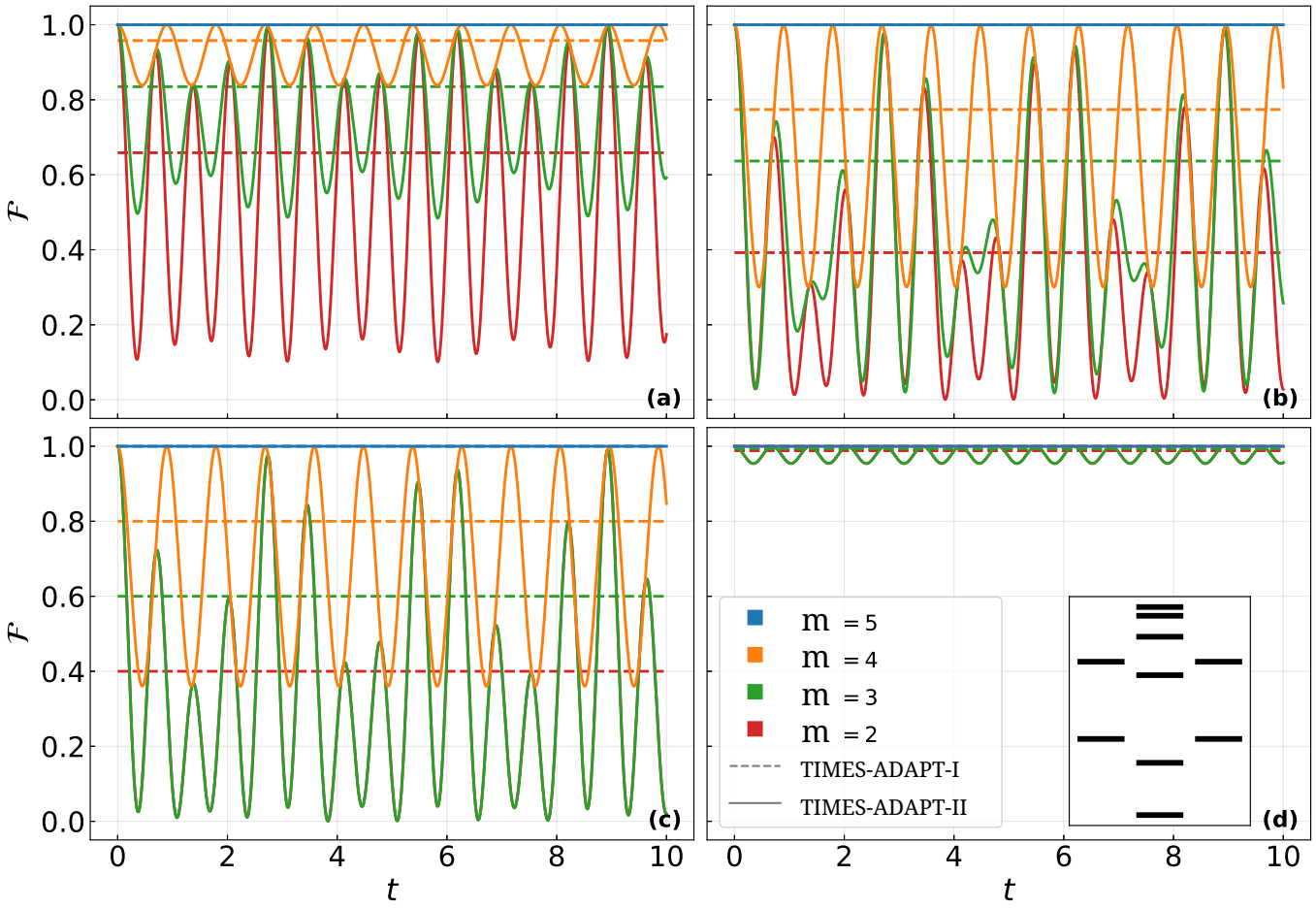

图 3. 使用 TIMES-ADAPT-I（虚线）和 TIMES-ADAPT-II（实线）得到的各种时间演化态与精确对角化结果的保真度。假设 **(a)**、**(b)**、**(c)** 中的初始态位于 H_{XXZ} 的前五个本征态张成的空间内。**(d)**中，初始态是所有本征态的线性组合，其系数为相应的玻尔兹曼权重。不同颜色对应于通过 TEPID-ADAPT 获知的子空间部分，如图所示。面板 **(a)**、**(b)** 展示随机初态的结果，而 **(c)** 和 **(d)** 分别展示系数服从均匀分布和指数分布时的结果。

• 在图3 **(a)**、**(b)**中，我们考虑两组随机系数 $\{\alpha_k\}_{k=1}^{5}$。此处，$\mathcal{N}=1$。

• 在图3 **(c)**中，我们考虑一个由前五个本征态等权叠加而成的态（即 α_k =1/$\sqrt{5}$）。此处，$\mathcal{N}=1$。

•在图 3 **(d)**中，我们考虑这样一种情况：系数随相应本征态的能量呈指数衰减（即 α_k =exp$(-E_k/2)/Z$，$Z=\sqrt{\sum_{k=1}^{2^{N_s}}\exp(-E_k)}$）。此处，$\mathcal{N}<1$ 因为我们考虑了对应于 H的每个本征态的非零系数。

使用 TIMES- ADAPT-I 演化的态的保真度损失 $m<5$保持不变，正如第 III 节所述。保真度由初始态投影到相应m维子空间后的范数决定（见附录 C）。这就是为什么对于 m 当初始态是 $m=5$ 子空间中本征态的等权叠加时（图 3**(c)**）。

另一方面，对于 TIMES-ADAPT-II，当 $m<5$ 时，保真度会发生振荡，其频率由 $m<5$ 子空间外本征态的能量决定。从图 3中可以看出，$m=4$ 对应的保真度以单一频率振荡，该频率对应于 $H_{\mathrm{XXZ}}(1.5)$ 的第四激发态与基态之间的能量差。对于$m<4$，保真度的振荡由多个频率描述，这正如预期。

当初始态以哈密顿量的本征基表示时，TIMES-ADAPT-I 更为适用。一个很好的应用是研究对称子空间中的初始态演化。在附录A中，我们给出了一个具体示例：在保持沿Z–方向自旋的系统中，研究单磁振子波包的演化。另一方面，当初始态以计算基表示，或我们只有对其进行黑箱访问的权限时，TIMES-ADAPT-II 更为适用

。一个很好的应用是研究低能初始态的演化。在附录A中，我们展示了自旋系统中能量输运的示例，其中初始态是模型基态的局域微扰。同样的方法也可以扩展到热输运的研究。

从资源消耗来看，TIMES-ADAPT-I 使用了一个额外的变分子程序（见附录B1），以求得初始态在截断本征基中的系数；但在已知这些系数后，算法中只需应用一次 V_A 。TIMES-ADAPT-II 没有初始计算开销，但算法中需要同时应用 V_A 和 $V_A^\dagger$ 。因此，TIMES-ADAPT-I 可能更适用于近期应用，因为它能产生更浅的量子线路，代价是需要一个子程序来求得初始态在截断本征基中的系数。

V. 结论与展望

本文介绍了 TIMES-ADAPT，这是一种算法变分框架，利用固定深度量子线路，在子空间中实现哈密顿量下的实时演化。该算法将 TEPID-ADAPT [53] 用作子程序，通过制备吉布斯态，训练自适应生成的量子线路，使其同时针对目标子空间中的哈密顿量的多个本征态。该过程收敛后的参数还能直接给出该子空间中哈密顿量的能隙。我们提出的算法的第一个版本 TIMES-ADAPT-I，需要求得初始态在截断本征基中的展开。利用这些系数，并为其附加由各本征态演化产生的适当相位，我们可以在计算基中制备叠加态。再经由使用 TEPID-ADAPT 找到的基变换酉算符作用，即可得到时间演化态。在第二个版本 TIMES-ADAPT-II 中，我们直接利用基变换酉算符，在子空间中编译有效的时间演化酉算子。这样，无需知道初始态在截断本征基中的系数，也能使初始态演化。当然，当初始态完全位于 TEPID-ADAPT 找到的子空间中时，这种方法效果最佳。

在附录A中，我们提供了我们的方法可以应用的示例。对于 TIMES-ADAPT-I，我们考虑纵向场海森堡 XXZ 模型中单磁振子高斯波包演化的示例。该波包属于一个对称子空间，其中 Z 方向上的总自旋保持不变。我们可以使用 TEPID-ADAPT 找到张成该子空间的本征态，并使用基变换酉算符找到随时间演化的波包。这可以扩展到研究两个波包的散射。我们将在未来的工作中对此进行探索。对于 TIMES-ADAPT-II，我们考虑交错纵向场海森堡 XXZ 模型中的能量输运示例。我们研究系统基态上的局域微扰，并使用固定深度量子线路研究其演化。初始态主要位于低能量子空间中，因此能够获得高保真度，并且该保真度可在任意长的时间内保持。

这项工作的一个可能拓展方向，是研究更复杂的对称性子空间中的实时演化，这些子空间并不完全等同于低能子空间。高能物理模型中的电荷子空间就是一个很好的例子：给定电荷子空间中的某些构型具有较高能量。同样，在分子问题中，研究特定固定粒子数所对应子空间中的演化也很有意义。这些研究需要为 TEPID-ADAPT 谨慎选择初始计算子空间和池算符。我们也将此留待未来工作。

VI. 致谢

我们感谢 Norman Tubman、Tianci Zhou、Goksu Toga 和 Henry Lamm 富有成效的讨论。我们感谢 Mafalda Ramˆoa 和 Priya Batra 在 TIMES-ADAPT 开发过程中提出的宝贵意见。本文中的量子电路由 Quantikz 软件包 [55]生成。B. Sambasivam、K. Sherbert、K. Shirali 和 S. E. Economou 得到美国能源部科学办公室国家量子信息科学研究中心量子优势协同设计中心（C^2QA）的支持，合同编号为 DE-SC0012704。N. J. Mayhall 感谢美国能源部提供的资助（项目编号：DE-SC0024619）。E. Barnes 感谢美国能源部的支持（项目编号：DE-SC0025430）。

[1]I. Kassal, S. P. Jordan, P. J. Love, M. Mohseni, 和 A. Aspuru-Guzik, 美国国家科学院院刊 **105**, 18681（2008）, https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.0808245105。[2] H. H. S. Chan、R. Meister、T. Jones、D. P. Tew 和 S. C. Benjamin, 《科学进展》**9**, eabo7484（2023）, https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/sciadv.abo7484。[3] S. S. Kale 和 S. Kais, 《物理化学快报》**15**, 5633（2024）。[4] E. Gustafson、Y. Meurice 和 J. Unmuth-Yockey, 《物理评论D》**99**, 094503（2019）。[5] K. Yeter-Aydeniz、G. Siopsis 和 R. C. Pooser, 《新物理学杂志》**23**, 043033（2021）。[6] S. P. Jordan、H. Krovi、K. S. M. Lee 和 J. Preskill, 《Quantum》**2**, 44（2018）。

[7] M. C. Ba˜nuls、R. Blatt、J. Catani、A. Celi、J. I. Cirac、M. Dalmonte、L. Fallani、K. Jansen、M. Lewenstein、S. Montangero、C. A. Muschik、B. Reznik、E. Rico、L. Tagliacozzo、K. Van Acoleyen、F. Verstraete、U.-J. Wiese、M. Wingate、J. Zakrzewski 和 P. Zoller，《欧洲物理学杂志 D》74，165（2020）。[8] Z. Davoudi、C.-C. Hsieh 和 S. V. Kadam，《Quantum》8，1520 2024（）。[9] E. R. Bennewitz、B. Ware、A. Schuckert、A. Lerose、F. M. Surace、R. Belyansky、W. Morong、D. Luo、A. De、K. S. Collins、O. Katz、C. Monroe、Z. Davoudi 和 A. V. Gor- shkov，《Quantum》9，1773（2025）。[10] Y. Chai、A. Crippa、K. Jansen、S. K¨uhn、V. R. Pascuzzi、F. Tacchino 和 I. Tavernelli，《Quantum》9，1638（2025）。[11] Y. Yang、A. Christianen、S. Coll-Vinent、V. Smelyanskiy、M. C. Ba˜nuls、T. E. O'Brien、D. S. Wild 和 J. I. Cirac，《PRX Quantum》4，030320（2023）。[12] D. Hahn、D. J. Luitz 和 J. T. Chalker，《物理评论X》14，031029（2024）。[13] H. Perrin、T. Scoquart、A. I. Pavlov 和 N. V. Gnezdilov，《Communications Physics》8，95（2025）。[14] T. Eckstein、R. Mansuroglu、P. Czarnik、J.-X. Zhu、M. J. Hartmann、L. Cincio、A. T. Sornborger 和 Z. Holmes，npj量子信息10，84（2024）。[15] K. Seki、Y. Kikuchi、T. Hayata 和 S. Yunoki，《物理评论研究》7，023032（2025）。[16] J. Li、R. Fan、H. Wang、B. Ye、B. Zeng、H. Zhai、X. Peng 和 J. Du，《物理评论X》7，031011（2017）。[17] A. Anand、S. Srivastava、S. Gangopadhyay 和 S. Ghose，《科学报告》14，26890（2024）。[18] M. Asaduzzaman、R. G. Jha 和 B. Sambasivam，《物理评论D》109，105002（2024）。[19] C. Karrasch 和 J. E. Moore，《物理评论B》86，155156（2012）。[20] V. B. Bulchandani、C. Karrasch 和 J. E. Moore，《美国国家科学院院刊》117，12713（2020），https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.1916213117 .

[21] R. Or´us，《自然综述：物理学》1, 538 (2019). [22] R. P. Feynman，《国际理论物理学杂志》21, 467–488 (1982). [23] M. Suzuki，《数学物理杂志》32, 400 1991( ), https://pubs.aip.org/aip/jmp/article-pdf/32/2/400/19166143/400 1 online.pdf. [24] D. W. Berry, G. Ahokas, R. Cleve, and B. C. Sanders，《数学物理通讯》270, 359 (2007). [25]N. Wiebe, D. W. Berry, P. Høyer, and B. C. Sanders，《物理学杂志A：数学与理论》44, 445308 2011( ). [26] D. Poulin, A. Qarry, R.Somma, andF. Verstraete,《物理评论快报》106, 10.1103/physrevlett.106.170501 (2011). [27] A. M. Childs, Y. Su, M. C. Tran, N. Wiebe, and S. Zhu，《物理评论X》11, 011020 (2021). [28] E. Campbell，《物理评论快报》123, 10 1103 123 070503 2019 . /physrevlett. . ( ). [29] A. M. Childs, A. Ostrander, and Y. Su，《Quantum》3, 182 (2019). [30] B. S¸ahino˘glu and R. D. Somma，npj量子信息7, 10.1038/s41534-021-00451-w (2021). [31] A. M. Childs and N. Wiebe，《量子信息与计算》12, 901 924 2012– ( ). [32] S. Chakraborty，《Quantum》8, 1496 (2024). [33] A. M. Childs，《物理评论快报》102, 10 1103 102 180501 2009 . /physrevlett. . ( ). [34] A. M. Childs，《数学物理通讯》294, 581–603 (2009). [35] D. W. Berry and A. M. Childs，《量子信息与计算》12, 29–62 (2012). [36] G. H. Low and I. L. Chuang，《Quantum》3, 163 (2019). [37] E. K¨okc¨u, T. Steckmann, Y. Wang, J. K. Freericks, E. F. Dumitrescu, and A. F. Kemper，《物理评论快报》129, 070501 2022( ). [38] R. Wiersema, E. K¨okc¨u, A. F. Kemper, and B. N. Bakalov，npj量子信息10, 110 (2024). [39] N. H. Stair, R. Huang, and F. A. Evangelista，《化学理论与计算杂志》16, 2236 (2020). [40] E. N. Epperly, L. Lin, and Y. Nakatsukasa，《SIAM矩阵分析与应用杂志》43, 1263 (2022), https://doi.org/10.1137/21M145954X. [41] C. L. Cortes, A. E. DePrince, and S. K. Gray，《物理评论A》106, 042409 (2022). [42] X. Yuan, S. Endo, Q. Zhao, Y. Li, and S. C. Benjamin，《Quantum》3, 191 (2019). [43] C. Cˆırstoiu, Z. Holmes, J. Iosue, L. Cincio, P. J. Coles, and A. Sornborger，npj量子信息6, 82 (2020). [44] Y.-X. Yao, N. Gomes, F. Zhang, C.-Z. Wang, K.-M. Ho, T. Iadecola, and P. P. Orth，《PRX Quantum》2, 030307 (2021). [45] M. Benedetti, M. Fiorentini, and M. Lubasch，《物理评论研究》3, 033083 (2021). [46] S.-H. Lin, R. Dilip, A. G. Green, A. Smith, and F. Poll- mann，《PRX Quantum》2, 010342 (2021). [47] J. Gibbs, K. Gili, Z. Holmes, B. Commeau, A. Arrasmith, L. Cincio, P. J. Coles, and A. Sornborger，npj量子信息8, 135 (2022). [48] S. Barison, F. Vicentini, I. Cirac, and G. Carleo，《物理评论研究》4, 043161 (2022). [49] D. Linteau, S. Barison, N. H. Lindner, and G. Carleo，《物理评论研究》6, 023130 (2024). [50] F. Zhang, C.-Z. Wang, T. Iadecola, P. P. Orth, and Y.-X. Yao，《物理评论B》111, 094310 (2025). [51] S. Barison, F. Vicentini, and G. Carleo,《Quantum》5, 512 (2021). [52] G. Aguilar, S. Cichy, J. Eisert, and L. Bittel, (2024), arXiv:2408.00081 [量子物理]. [53] B. Sambasivam, K. Sherbert, K. Shirali, N. J. Mayhall, E. Barnes, and S. E. Economou, (2025), arXiv:2503.14490 [量子物理]. [54] G. Xu, Y. B. Guo, X. Li, K. Wang, Z. Fan, Z. S. Zhou, H. J. Liao, and T. Xiang，《物理评论A》107, 052423 (2023). [55] A. Kay, (2023), arXiv:1809.03842 [量子物理]. [56] Y. S. Yordanov, V. Armaos, C. H. W. Barnes, and D. R. M. Arvidsson-Shukur，《Communications Physics》4, 228 2021( ). [57] B. Zindorf and S. Bose，《物理评论应用》24, 044030 (2025). [58] P. G. Anastasiou, Y. Chen, N. J. Mayhall, E. Barnes, and S. E. Economou，《物理评论研究》6, 013254 (2024). [59] A. Barenco, A. Berthiaume, D. Deutsch, A. Ekert, R. Jozsa, and C. Macchiavello，《SIAM计算杂志》26, 1541 (1997), https://doi.org/10.1137/S0097539796302452. [60] H. Buhrman, R. Cleve, J. Watrous, and R. de Wolf，《物理评论快报》87, 167902 (2001).

[61] V. Havlíˇcek, A. D. C´orcoles, K. Temme, A. W. Harrow, A. Kandala, J. M. Chow 和 J. M. Gambetta，《自然》**567**，209–212（2019）。

附录 A：应用

在本附录中，我们探讨 TIMES-ADAPT 的两种应用：波包演化和自旋系统中的能量输运。这些应用分别用于说明第 III 节中介绍的 TIMES-ADAPT 两个版本。

1. 波包演化

在研究自旋系统中的散射时，找到高效模拟波包实时动力学的方法至关重要。本小节将考察一个具有开放边界条件的七量子比特纵场海森堡 XXZ 模型（纵场 XXZ 模型）中单磁振子高斯波包的演化，其哈密顿量为

$$H_{\mathrm{LFXXZ}}(J_z,h_z)=\sum_{k=1}^{N_s-1}\left(\sigma_k^x\sigma_{k+1}^x+\sigma_k^y\sigma_{k+1}^y+J_z\sigma_k^z\sigma_{k+1}^z\right)+h_z\sum_{k=1}^{N_s}\sigma_k^z, \quad \text{(A1)}$$

其中，J_z 是 Z方向的耦合，h_z 是纵向磁场的强度，N_s 是自旋链中的自旋数，而 $\sigma^{x,\,y\,z}_{j}$ 是作用于量子比特 j上的泡利算符。该哈密顿量保持 Z方向上的自旋：

$$[S_z,H_{\mathrm{LFXXZ}}(J_z,h_z)]=0,\quad S_z\equiv\sum_{j=1}^{N_s}\sigma_j^z. \quad \text{(A2)}$$

单磁振子波包及其后续时间演化都处于对称子空间 $\mathbf{S}_1$ 中，其中 $\langle S_z\rangle=N_s-2$,

$$\mathbf{S}_1\equiv\mathrm{span}\left\{\sigma_1^x|0\rangle^{\otimes N_s},\cdots,\sigma_{N_s}^x|0\rangle^{\otimes N_s}\right\}. \quad \text{(A3)}$$

位于格点j_0 、标准差为 λ 的单磁振子高斯波包为

$$|\psi_{\mathrm{G}}(j_0,\lambda,0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}\sum_{j=1}^{N_s}\exp\left(-\frac{\lambda^2}{2}(j-j_0)^2\right)\sigma_j^x|0\rangle^{\otimes N_s}, \quad \text{(A4)}$$

其中 $\mathcal{N}\equiv\sum_{j=1}^{N_s}\exp\left(-\lambda^2(j-j_0)^2\right)$ 是归一化因子。为了研究该态的实时演化，我们首先使用 TEPID-ADAPT 找到张成 N_s 本征态$\{|\psi_k\rangle\}_{k\in\mathbf{S}_1}$ 的 $H_{\mathrm{LFXXZ}}(J_z,h_z)$。对于 TEPID-ADAPT，合适的计算基组是 $\mathbf{S}_1$。图$\mathbf{S}_1$。构建图中的基变换酉算符 V_A（见图1 ）的合适算符池由保持 S_z不变的算符组成。这里我们使用基于量子比特激发的（QEB）算符池 [56] 。

收敛后的基变换酉算符将选定的计算基组映射到张成$\mathbf{S}_1$ 的 H_{LFXXZ} 本征态：

$$V_A(\vec{\theta}^*):\sigma_j^x|0\rangle^{\otimes N_s}\to|\psi_j\rangle\in\mathbf{S}_1,\quad \forall j=1,\cdots,N_s. \quad \text{(A5)}$$

接下来，我们求出哈密顿量本征基中 $|\psi_{\mathrm{G}}(j_0,\lambda,0)\rangle$的系数 $\{\alpha_k\}_{k\in\mathbf{S}_1}$，

$$|\psi_{\mathrm{G}}(j_0,\lambda,0)\rangle=\sum_{k\in\mathbf{S}_1}\alpha_k|\psi_k\rangle, \quad \text{(A6)}$$

使用附录 B1中概述的方法。已知 $\{\alpha_k\}_{k\in\mathbf{S}_1}$后，我们可以使用 TIMES-ADAPT-I，通过固定深度量子线路获得任意时刻 t的演化波包。

图 4展示了式（A6）中的单磁振子波包在 $H_{\mathrm{LFXXZ}}(-1.5,0.25)$ 下的实时动力学。左图展示了所示格点的逐位磁化强度 $1-\langle\sigma_j^z\rangle$ 随时间的演化。实线对应精确对角化的结果，圆圈对应使用 TIMES-ADAPT-I 得到的结果。右图展示了相对于精确对角化所得态的非保真度。我们还给出了采用一阶 Trotter 分解的结果（三角形）；其中步长 δt 的选取使量子线路的双量子比特门深度与 TIMES-ADAPT-I 相同，后者的深度由态制备（见式（7））和基变换酉算子 $V_A(\theta^*)$ 的深度之和构成。对于全连接量子比特连通性，总双量子比特门深度的上界为 $8m(N_s-1)+11N_{\mathrm{adapt}}$，其中 N_{adapt} 是 ADAPT-VQE 的层数。在我们的例子中，取 $N_s=m=7$和 $N_{\mathrm{adapt}}=7$时，双量子比特门深度为 413。我们利用以下两个结果得到该上界：

- 在参考文献 [57]，中，作者证明了任意 n受控 SU(2) 酉算子都可以通过 CNOT 深度为 $8n$（对于 $n\geq 6$）的方式实现。我们这里的态制备电路如附录 B所示，由一系列 m这样的门组成，因此初态制备的双量子比特深度为 $8m$（N_s-1）。
- 对于 TETRIS-ADAPT-VQE 协议，我们使用 QEB 池 [58] ，因为它保留了 S_z。参考文献 [56]，证明了，在全连接量子比特连通性的情况下，成本更高的双激发算符可以通过 CNOT 深度为 11 的量子线路实现。假设每个 $N_{\text{自适应}}$层 $V_A(\theta^*)$ 至少包含一个双激发算符，则全连接条件下基变换酉算子的双量子比特门深度上界为$11N_{\text{自适应}}$。

$H_{\mathrm{LFXXZ}}(J_z,\ h_z)$ 的一阶 Trotter 分解为

$$e^{-i\,H_{\mathrm{LFXXZ}}\,\delta t}\approx\left(e^{-i\,H_{\mathrm{o}}\delta t}\,e^{-i\,H_{\mathrm{e}}\delta t}e^{-i\,H_z\delta t}\right)^{N_t}, \quad \text{(A7)}$$

其中 $H_{\mathrm{o},\ \mathrm{e}}$ 分别是式（A2）中哈密顿量相互作用项，起始于奇数和偶数格点，

而 H_z 包含所有单量子比特项。总演化时间为 $T = 10.0$，其中有 $N_t = 68$ 个 Trotter 步，对应于 $\delta t \approx 0.15$。随着时间推移，Trotter 结果逐渐偏离精确演化，同时资源开销不断增加；而 TIMES-ADAPT-I 即使在任意长时间下仍保持准确，且使用固定深度电路。我们注意到，尽管总态的保真度随时间推移而下降，但对于图 4 左图所示的晶格边界格点上的局域可观测量，Trotter 结果的精度仍优于同一可观测量在体格点上的结果。这是因为体格点有两个最近邻，而边界格点只有一个，因此 Trotter 误差在体格点上累积得更快。

2. 能量输运

能量输运问题涉及在较长时间尺度内模拟系统受扰基态的动力学。本小节将考察在具有周期性边界条件、并施加交错外部纵向磁场的海森堡XXZ模型（SFXXZ）基态上施加高斯扰动后的演化，该模型由以下哈密顿量描述：

$$H_{\mathrm{SFXXZ}}(J_z, h_z) = \sum_{k=1}^{N_s} \left(\sigma_k^x \sigma_{k+1}^x + \sigma_k^y \sigma_{k+1}^y + J_z \sigma_k^z \sigma_{k+1}^z\right) + h_z \sum_{k=1}^{N_s} (-1)^k \sigma_k^z, \quad \text{(A8)}$$

其中，J_z 是 Z方向上的耦合，h_z 是交错磁场的强度，N_s 是自旋链中的自旋数，而 σ^x、σ^y、σ^z 是作用于量子比特 j上的泡利算符。该模型已在 [20]中用于研究能量和热输运。本节研究在 $H_{\mathrm{SFXXZ}}(1.5,\ 0.5)$ 下的动力学。初始受扰态记为$|\psi_p(k_0,\ \sigma,\ 0)\rangle$，它是以下受扰哈密顿量的基态：

$$H_g \equiv H_{\mathrm{SFXXZ}}(1.5, 0.5) + \delta H, \quad \text{(A9)}$$

其中，扰动 δH 为 H_{SFXXZ}，其非均匀耦合服从高斯分布，分布中心位于晶格中心：

$$\delta H = \sum_{k=1}^{N_s} J_k \left(\sigma_k^x \sigma_{k+1}^x + \sigma_k^y \sigma_{k+1}^y + \sigma_k^z \sigma_{k+1}^z + (-1)^k \sigma_k^z\right), \quad \text{(A10)}$$

with

$$J_k = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-i\,(k-k_0)^2/(2\,\sigma^2)}, \quad \text{(A11)}$$

其中，k_0, σ 分别为该分布的均值和标准差。初始态 $|\psi_p(k_0, \sigma, 0)\rangle$主要（但并非完全）位于 H_{SFXXZ}的低能子空间中，因此适合用于测试 TIMES-ADAPT-II。由于 H_{SFXXZ} 和 H_g 均与S_z对易，非均匀初始态的演化始终保持在 $S_z = 1.0$取值固定的子空间中。随后，我们使用 TIMES-ADAPT-II 通过固定深度量子线路研究该态在 $H_{\mathrm{SFXXZ}}(J_z, h_z)$ 下的动力学。

在图 5中，展示了受扰态的能量输运$|\psi_p(4,\ 1。0,\ 0)\rangle$ 在 $H_{\mathrm{SFXXZ}}(1。5,\ 0。5)$ 条件下的结果。左图展示了格点能量密度的演化

$$H_k = \sigma_k^x \sigma_k^x + \sigma_k^y \sigma_k^y + J_z \sigma_k^z \sigma_k^z + (-1)^k h_z \sigma_k^z, \quad \text{(A12)}$$

其中，格点 $N_s + 1$ 是周期晶格上的第一个格点。实线表示精确对角化得到的结果，虚线表示使用 TIMES-ADAPT-II 得到的结果。右图展示了相对于精确对角化结果的不保真度。我们还给出了采用一阶 Trotter化的结果（点线），其中步长δt 的选取使量子线路的双量子比特门深度（全连接）与 TIMES-ADAPT-II 中应用的式（11）中的酉算符 $U(t)$ 的双量子比特门深度相匹配。请注意，此处没有态制备开销。全连接情况下的双量子比特门总深度为$8m(N_s - 1) + 2 \times 11 N_{\mathrm{adapt}}$，其中 N_{adapt} 是 ADAPT-VQE 的层数。深度中的第一项是式（10）中的对角酉算子 $D(t)$ 的开销，可分解为一系列 m 多重控制$SU(2)$ 酉算子。开销中的第二项来自用基变换酉算符 $V_A(\vec{\theta}^*)$ 对 $D(t)$ 进行共轭。在我们的情况下，$N_s = 7$ 且 $m = 4$，双量子比特门总深度为 1534。尽管从门数量来看，TIMES-ADAPT-II 的开销更大，但其优势在于无需知道初始态在截断本征基中的系数。Trotter化按照式（A7）所示的相同方式进行，此处的 H_z 为交错磁场。总演化时间为 $T = 10.0$，其中 $N_t = 255$。

从图 5的右图可以看出，TIMES-ADAPT-II 生成的演化的保真度损失在较长时间内仍然较低（$1 - \mathcal{F} \sim \mathcal{O}(10^{-3})$），而一阶 Trotter 分解的保真度损失则会增大，最高可达其一个数量级。利用图 5左图所示的可观测量，也可以得出类似结论。尽管由 TIMES-ADAPT-II 得到的可观测量演化与精确对角化结果并不完全吻合，但仍与之接近。通过提高 TEPID-ADAPT 所求本征态数量的截断值，还可以进一步改善这一结果。另一方面，Trotter 结果中的可观测量值方差则大得多。

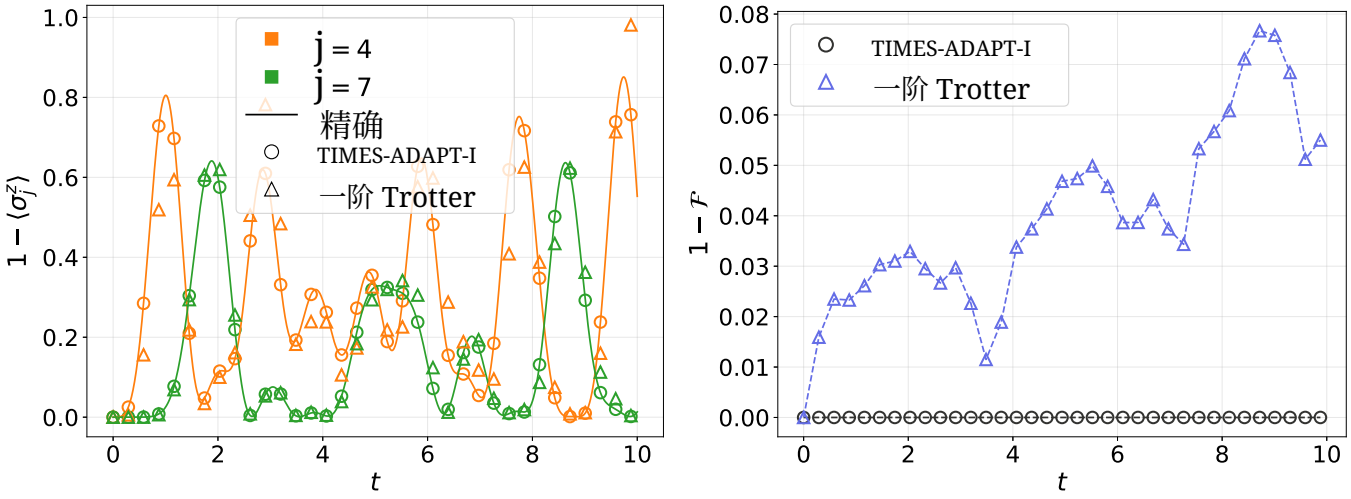

图 4. 纵向场 XXZ 模型中单磁振子高斯波包的时间演化。（左）使用 TIMES-ADAPT-I（圆圈）、一阶 Trotter（三角形）和精确演化（实线）得到的图示格点上的格点磁化强度演化。（右）TIMES-ADAPT-I（圆圈）和一阶 Trotter（三角形）相对于精确演化的不保真度。Trotter 结果的步长经过选择，使其双量子比特门深度与酉 TIMES-ADAPT-I 协议相同。为清晰起见，图中仅显示偶数 Trotter 步。

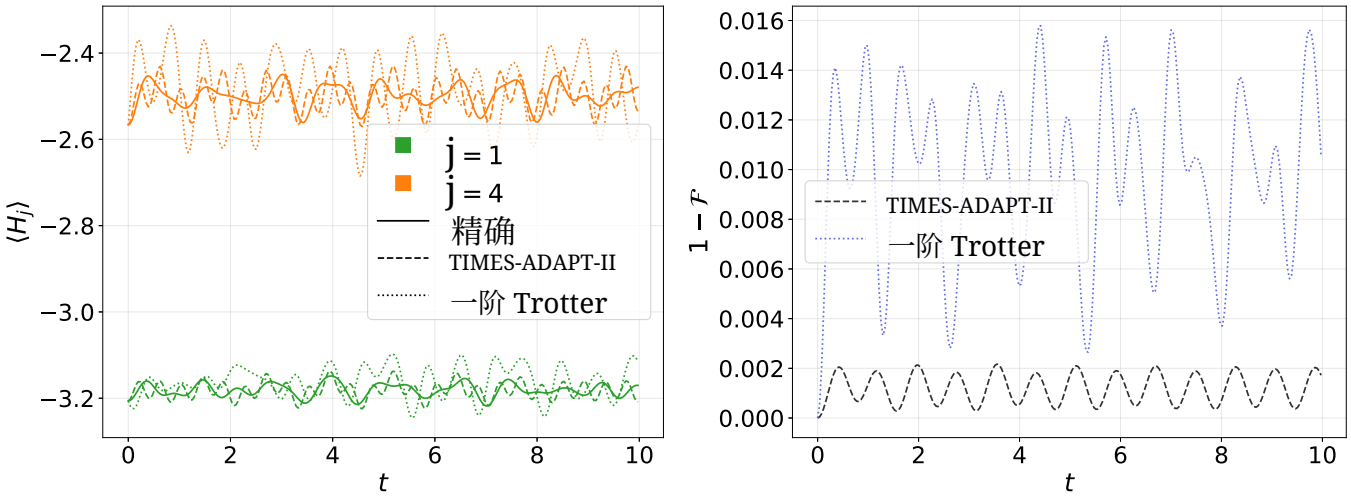

图 5. 交错纵向场 XXZ 模型中非均匀低能态的时间演化。（左）使用 TIMES-ADAPT-II（虚线）、一阶 Trotter（点线）和精确演化（实线）得到的图示格点上的能量密度演化。（右）TIMES-ADAPT-II（虚线）和一阶 Trotter（点线）相对于精确演化的不保真度。Trotter 结果的步长经过选择，使其双量子比特门深度与 TIMES-ADAPT-II 协议相同。

附录 B：初始态

在本附录中，我们说明如何制备态 $|\chi(t)\rangle$，该态在式（7）中定义，并在下文重述：

$$|\chi(t)\rangle = \sum_{k=1}^{m} \alpha_k \, e^{-i\,E_k\,t}\,|c_k\rangle\,.$$

我们将再次假设它位于由截断本征基张成的子空间中，并且我们知道其对应的系数 $\{\alpha_k\}_{k=1}^{m}$。我们从态 $|0\rangle^{\otimes N_s}$，并依次应用一系列经过修改的 Givens 旋转

$$\tilde{G}^{(k,k+1)}(\theta_k,\varphi_k) \equiv \exp\left(i\,\theta_{k+1}\,P^{(k)}\right)\times \exp\left(i\,\varphi_k\gamma^{(k,k+1)}\right)\exp\left(-i\,\theta_{k+1}\,P^{(k)}\right), \quad \text{(B1)}$$

其中

$$\left[\gamma^{(k,k+1)}\right]_{x,y} = i\left(\delta_{x,c_k}\,\delta_{y,c_{k+1}} - \delta_{x,c_{k+1}}\,\delta_{y,c_k}\right), \quad \text{(B2)}$$

and

$$\left[P^{(k)}\right]_{x,y} = \delta_{x,c_k}\,\delta_{y,c_k}, \tag{B3}$$

使用 $[\cdot]_{x,\,y}$ 表示 $(x,\ y)^{th}$ 矩阵元，并使用 $\delta_{i,\,j}$ 表示克罗内克δ。 γ 在两个计算基元素之间生成旋转，而 P 在特定的基元素上生成相位。下标 c_k 表示一个计算基元素。例如，$|1101\rangle$对应于克罗内克δ中的下标 13。从几何角度看，这一系列修正的吉文斯旋转对应于从 (1，0，...，0) 到一个一般复单位向量的旋转

$$(1,0,\ldots,0) \to \left(\alpha_1\, e^{-i\,E_1\,t},\ldots,\alpha_m\, e^{-i\,E_m\,t},0,\ldots,0\right), \tag{B4}$$

相差一个整体相位。这里，向量采用计算基表示；为便于展示，我们重新排列了计算基，使得 $\{|c_k\rangle\}_{k=1}^{m}$ 的系数出现在上述向量的前 m 个元素中。其余分量对应于用 $2^{\lceil \log_2 m\rceil} - m$ 个零进行填充。接下来，我们用系数 $\{\alpha_k\}_{k=1}^{m}$表示量子门角参数化。首先，将复系数转换为极坐标形式，并重写公式（7）：

$$\begin{aligned} \alpha_k &\equiv r_k\, e^{i\,\zeta_k}, \\ |\chi(t)\rangle &= \sum_{k=1}^{m} r_k e^{i(\zeta_k - E_k\,t)}\,|c_k\rangle\,. \end{aligned} \tag{B5}$$

引入记号 $\Delta[\cdot]_k \equiv [\cdot]_k - [\cdot]_1$，我们提取并舍弃全局相位 $\zeta_1 - E_1 t$，得到

$$|\chi(t)\rangle \simeq \sum_{k=1}^{m} r_k e^{i(\Delta\zeta_k - \Delta E_k\,t)}\,|c_k\rangle\,. \tag{B6}$$

能量差 $\Delta E_k \equiv (E_k - E_1)$ 可从 TEPID-ADAPT 的收敛参数中直接获得。因此，进入我们修改后的吉文斯旋转中的相位参数 θ_k 为

$$\theta_k(t) \equiv \begin{cases} 0 & k = 1 \\ \\ \xi_{k-1}(t) - \xi_k(t) & k > 1 \end{cases}, \tag{B7}$$

其中 $\xi_k(t) = \Delta\zeta_k - \Delta E_k\, t$。这些可以解释为各系数的相位 α_k （提取出一个全局相位后），并叠加了一个随时间变化的项，用以描述各特征向量的进动。与此同时，旋转参数 φ_k 与振幅$r_k \equiv |\alpha_k|$ 之间通过超球坐标变换相关联

$$\sqrt{r_j} = \begin{cases} \left(\prod_{k=1}^{j-1}\sin(\varphi_k)\right)\cos(\varphi_j) & 1 \le j < m \\ \\ \left(\prod_{k=1}^{m-1}\sin(\varphi_k)\right) & j = m \end{cases}. \tag{B8}$$

如果我们知道 $|\psi(0)\rangle$ 在本征基$\{\alpha_k\}_{k=1}^{m}$中的系数，就可以对式（B8）中的变换求逆，并应用图6中的量子线路，以获得任意时刻的时间演化态。

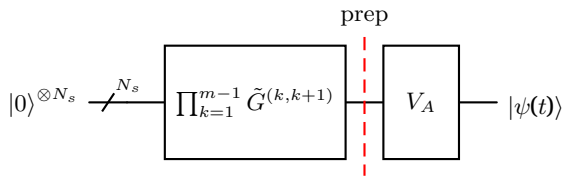

图 6. 用于制备时间演化态的框图。虚线之后的态是 $|\chi(t)\rangle$，见式（7）。随后，作用 V_A 以制备时间演化态。每个修正的 Givens 旋转的参数为（$\theta_k(t)$ φ_k）。

1. 确定系数

到目前为止，我们假设已知初始态 $|\psi(0)\rangle$在截断本征基中的系数。本小节将介绍一种确定这些系数的方法，并假设我们有一个制备 $|\psi(0)\rangle$的量子线路。我们运行一个变分量子算法，使用图6 中的量子线路，并将角度（$\vec{\theta}(0)$ $\vec{\varphi}$）作为变分参数。该算法的代价函数是变分制备的态 $\left|\phi(\vec{\theta}(0)\ \vec{\varphi})\right\rangle$ 与 $|\psi(0)\rangle$之间的不保真度。

$$C(\vec{\theta}(0),\vec{\varphi}) = 1 - |\langle\psi(0)|\,\phi(\vec{\theta}(0),\vec{\varphi})\rangle|^2. \tag{B9}$$

这可以通过交换测试高效地测量 [59,60] 或“计算-反计算”方法 [61]。如果代价函数在收敛时为零，我们就知道 $|\psi(0)\rangle$位于截断本征空间中。否则，我们可以估计时间演化中的误差，正如我们在附录C中所示。

附录 C：误差分析

在本附录中，对于我们采用的两种方法，当初始态 $|\psi(0)\rangle$ 并非完全位于 TEPID-ADAPT 找到的子空间中时，我们将误差表示为时间的函数。下文中，我们考虑一个初始态 $|\psi(0)\rangle$，它位于由哈密顿量 H 的本征态 $\{|\psi_k\rangle\}_{k\in\mathbf{S}'}$ 张成的子空间$\mathbf{S}'$ 中：

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{k\in\mathbf{S}'} \alpha_k\,|\psi_k\rangle\,. \tag{C1}$$

令$\mathbf{S} \subseteq \mathbf{S}'$ 为由 TEPID-ADAPT 找到的、由本征态 $\{|\psi_k\rangle\}_{k\in\mathbf{S}'}$ 张成的子空间。

1. TIMES-ADAPT-I

使用 TIMES-ADAPT-I，我们实际上演化 $|\psi(0)\rangle$ 在$\mathbf{S}$上的投影

$$|\psi_{\mathbf{S}}(0)\rangle \sim \mathbb{P}_{\mathbf{S}}\,|\psi(0)\rangle = \sum_{k\in\mathbf{S}} \alpha_k\,|\psi_k\rangle\,, \tag{C2}$$

其中， $\mathbb{P}_{\mathbf{S}}$ 是子空间$\mathbf{S}$上的投影算符。相应的时间演化态为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{k\in\mathbf{S}'} \alpha_k\, e^{-i\,E_k\,t}\,|\psi_k\rangle\,, \tag{C3}$$

$$|\psi_{\mathbf{S}}(t)\rangle = \sum_{k\in\mathbf{S}} \alpha_k\, e^{-i\,E_k\,t}\,|\psi_k\rangle\,. \tag{C4}$$

这两个态之间的保真度为

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(t) &\equiv |\langle\psi_{\mathbf{S}}(t)|\,\psi(t)\rangle|^2 \\ &= \left|\sum_{l\in\mathbf{S}',\,k\in\mathbf{S}} \alpha_k^*\,\alpha_l\, e^{-i\,(E_l-E_k)\,t}\langle\psi_k\,|\psi_l\rangle\right|^2,\end{aligned} \tag{C5}$$

由于本征态彼此正交，波函数重叠将产生克罗内克δ

$$\mathcal{F}(t) = \left(\sum_{k\in\mathbf{S}}|\alpha_k|^2\right)^2. \tag{C6}$$

保真度与时间无关，因此只需知道初始态的保真度，就能得知任意时刻的保真度。该量是变分量子算法代价函数的最小值，该算法用于求得本征基中的系数，详见附录B1。

TEPID-ADAPT 在子空间 $\mathbf{S}$ 中找到的时间演化态为

$$|\psi_{\mathbf{S}}(t)\rangle = \sum_{k\in\mathbf{S}} \alpha_k\, e^{-i\,\tilde{E}_k\,t}\,|\psi_k\rangle\,, \tag{C7}$$

其中，有效能量对应于在第 ˜节中引入的有效哈密顿量 H III。这些能量在式（C8）中明确给出。

2. TIMES-ADAPT-II

使用 TIMES-ADAPT-II，我们通过有效哈密顿量 ˜， $|\psi(0)\rangle$ 演化完整的初始态 H，该有效哈密顿量在第 III 节中引入，其能量为

$$\tilde{E}_k = \begin{cases} E_k & k\in\mathbf{S} \\ \\ 0 & k\in\mathbf{S}'\setminus\mathbf{S} \end{cases}, \tag{C8}$$

得到态

$$|\psi_{\mathbf{S}}(t)\rangle = \sum_{k\in\mathbf{S}} \alpha_k\, e^{-i\,E_k\,t}\,|\psi_k\rangle + \sum_{k\in\mathbf{S}'\setminus\mathbf{S}} \alpha_k\,|\psi_k\rangle\,. \tag{C9}$$

在此, f为了方便于分析，我们选择在 H 的本征基中展开态在 $\mathbf{S}'\setminus\mathbf{S}$ 中的部分。这些本征态不随时间演化。与完整哈密顿量作用下演化的态之间的保真度为

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(t) &\equiv |\langle\psi_{\mathbf{S}}(t)|\,\psi(t)\rangle|^2 \\ &= \left|\sum_{l,k\in\mathbf{S}'} \alpha_k^*\,\alpha_l\, e^{-i\,(E_l-\tilde{E}_k)\,t}\langle\psi_k\,|\psi_l\rangle\right|^2,\end{aligned} \tag{C10}$$

由于本征态的正交性，波函数重叠将产生一个克罗内克δ。利用式（C8），保真度可简化为:

$$\mathcal{F}(t) = \left|\sum_{k\in\mathbf{S}}|\alpha_k|^2 + \sum_{k\in\mathbf{S}'\setminus\mathbf{S}}|\alpha_k|^2\, e^{-i\,E_k\,t}\right|^2. \tag{C11}$$

与 TEPID-ADAPT-I 不同，现在不保真度取决于初始态 $|\psi(0)\rangle$ 的所有 分量（而不仅仅是 $\mathbf{S}$ 中的分量）。保真度呈现振荡行为，其频率由不在$\mathbf{S}$中的本征态能量决定。因此，根据我们关注的时间，该保真度可能高于也可能低于 TIMES-ADAPT-I 的保真度。