arXiv:2603.17062v1 [quant-ph] 17 Mar 2026

采用全局谱离散化的含时哈密顿量全量子变分动力学模拟

Minchen Qiao, [1, 2, *] Zi-Ming Li, [1, 2, *] 和 Yu-xi Liu[1, 2, †]
[1] School of Integrated Circuits, Tsinghua University, Beijing 100084, China [2] Frontier Science Center for Quantum Information, Beijing, China
（日期：2026年3月19日）

目前，通过量子计算模拟含时哈密顿量动力学的最广泛使用的方法，依赖于量子-经典混合变分量子时间演化算法；该算法通过经典模拟和时间离散化方法求解用于确定时间演化的变分系数常微分方程。本文提出一种全量子方法：利用切比雪夫谱离散化方法将变分系数的常微分方程转化为静态线性方程，再通过量子奇异值变换算法求解。我们的全量子算法无需经典反馈，对光滑哈密顿量具有指数收敛性，并且量子电路深度与时间步数无关。我们展示了两种实现策略：面向容错架构设计的全局形式，以及适用于近期设备的序贯形式；并通过对质子-氢电荷转移动力学这一典型含时量子化学问题的数值模拟，验证了该方法。该工作为从量子-经典混合变分量子算法迈向适用于一般含时哈密顿量的全量子求解器确立了一条系统化路径，尤其适用于动力学可由紧凑变分描述的系统，并为在含时模拟中实现全量子计算优势开辟了道路。

I. 引言

哈密顿量模拟是量子计算最自然、最基础的应用之一，为探究量子系统的动力学行为提供了直接途径 [1, 2]。尽管定态哈密顿量的算法研究已取得显著进展 [3–5], 许多至关重要的现象都由含时相互作用支配。这类含时哈密顿量动力学普遍存在于原子与分子物理 [6, 7], 量子化学 [8–10], 以及量子控制 [11–13]等领域。一个典型例子是离子–原子电荷转移：电子波函数在沿核轨迹连续变化的双中心库仑势作用下演化，这是一个典型的含时量子问题 [14]。在这些情形中，随着系统规模扩大、动力学复杂性增加，要准确模拟量子动力学，往往需要解析高维希尔伯特空间中的长时间演化。因此，与定态问题相比，含时问题带来了独特的算法挑战 [15]。

人们已开发出多种量子算法来模拟含时哈密顿量的动力学，主要包括量子-经典混合变分方法和全量子方法。量子-经典混合变分方法包括量子辅助方法 [16–18] 和量子参数化方法 [19, 20], ，已在量子化学和多体物理领域得到广泛应用。在这些方法中，参数化量子态被用于降低动力学的有效维度 [21]。尤其是，近期研究表明，量子-经典混合变分方法可用于求解离子-原子碰撞动力学 [22]。然而，这些量子-经典混合算法高度依赖经典反馈，这限制了其速度和性能。另一类方法是全量子求解器，包括乘积公式方法 [23–25],截断戴森级数算法 [26–28], 基于 Magnus 展开的方法 [29, 30]，以及连续 qDRIFT 等随机化方案 [31]。这些方法无需经典计算机辅助，而是直接近似或随机采样按时间排序的演化算子。然而，它们在算子层面运行，不进行降维，同时电路深度会随模拟时间和哈密顿量的稀疏性增加而增长。

我们在此提出一种全新的全量子方法，通过结合变分方法的降维能力与全量子求解器的相干执行，在量子计算机上求解含时哈密顿量的动力学，从而绕开深电路瓶颈和经典反馈开销。该方法整合了变分参数化、谱离散化和量子线性系统求解器，用于模拟含时哈密顿量的动力学。首先，我们在变分框架内重新表述含时薛定谔方程，得到一组耦合常微分方程，用以描述变分参数的演化。随后，通过在时间上采用切比雪夫谱展开，将这些常微分方程映射为一个时间无关的线性系统，其结构显式编码了动力学的时间依赖性。

* 这些作者对本研究贡献相同。
† yuxiliu@mail.tsinghua.edu.cn

然后，使用量子奇异值变换（QSVT）算法求解所得线性系统，从而无需直接近似时间序演化算符即可重建量子动力学。在此框架下，全局形式和序贯形式自然成为互补的实现方式，可根据不同的系统规模和量子资源约束灵活调整。我们以质子-氢电荷转移动力学为例，展示了该方法。这个单电子碰撞问题天然满足变分子空间压缩最有效的适用条件：物理上可实现的动力学局限于完整希尔伯特空间中的低维子空间，因此能够借助紧凑拟设大幅降维。原则上，该方法适用于任何可表示为幺正算子线性组合形式的含时哈密顿量。

本文结构如下。在第II节中，我们推导将含时薛¨定谔方程变分投影到低维子空间的方法，利用切比雪夫谱方法离散运动方程，并构造整体和顺序线性系统表述。在第III节中，我们展示如何利用基于量子奇异值变换的量子线性系统算法求解所得线性方程。在第IV节中，我们以质子-氢电荷转移动力学为例验证所提方法，并考察两种表述的谱收敛、态保真度和量子资源需求。最后，我们在第V节介绍结论并展望其更广泛的应用。

II. 理论框架

本节中，我们通过变分参数化将含时薛¨定谔方程重构为低维常微分方程组，随后利用谱方法离散所得动力学，最后将该问题编码为线性系统，以便使用量子线性求解器进行量子计算。

A. 变分参数化

由含时哈密顿量 $H(t)$ 控制的封闭量子系统的动力学由含时薛定谔方程描述，

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

我们考虑可表示为幺正算子线性组合（LCU）的含时哈密顿量形式：

$$H(t) = \sum_{\gamma} g_\gamma(t) H_\gamma, \tag{2}$$

其中 $g_\gamma(t) \in \mathbb{C}$是含时系数，而$H_\gamma = \bigotimes_{p=0}^{N_Q-1} \sigma_p$ 是 N_Q 量子比特泡利串，每个泡利串均定义为单量子比特泡利算符的张量积。这种泡利和表示自然出现在量子多体系统中，其中二次量子化哈密顿量通过标准的费米子到量子比特变换（例如 Jordan–Wigner 映射或布拉维–基塔耶夫映射）映射到量子比特上 [32, 33]。更广泛地说，有限维希尔伯特空间上的任何有界算子都可以分解为泡利串，因此这一框架的适用范围不限于量子多体系统 [34–36]。

为降低求解方程（1）的计算复杂度，我们将动力学投影到一个变分子空间中。具体而言，我们将演化的量子态表示为

$$|\Psi[\boldsymbol{\alpha}(t)]\rangle = \sum_{i=0}^{N_\alpha-1} \alpha_i(t)|\varphi_i\rangle, \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}(t) = [\alpha_0(t)\ldots,\alpha_i(t)\ldots,\alpha_{N_\alpha-1}(t)]^\top \in \mathbb{C}^{N_\alpha}$表示 N_α 对应于变分量子态的时间依赖变分参数 N_α $|\varphi_i\rangle$，而 $|\varphi_i\rangle = U_i|\varphi_0\rangle$ 其中 $U_0 = I$ 是通过对参考态作用一组幺正算子而构造的正交归一基态 U_i $|\varphi_0\rangle$。本文采用由式（2）中的线性组合酉哈密顿量构造的简化累积 K 阶矩拟设。该拟设生成线性无关且正交归一的基底，能够有效捕捉系统的相关动力学。

接下来，我们应用 McLachlan 变分原理 [37]推导 $\boldsymbol{\alpha}$ (t) 的运动方程，从而最小化精确时间演化与变分时间演化之间残差的范数。由此得到以下演化方程：

$$\frac{d\boldsymbol{\alpha}(t)}{dt} = \left[-i\sum_{\gamma} g_\gamma(t)\mathbf{N}^{-1}\mathbf{M}_\gamma\right]\boldsymbol{\alpha}(t), \tag{4}$$

其中，重叠矩阵$\mathbf{N}$和哈密顿量耦合矩阵$\mathbf{M}^\gamma$ 定义为

$$\begin{aligned} N_{ij} &= \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle, \\ M_{\gamma,ij} &= \langle\varphi_i|H_\gamma|\varphi_j\rangle. \end{aligned} \tag{5}$$

如果拟设可以高效地进行经典模拟，则可以经典计算这些矩阵元素；也可以通过量子计算机使用直接测量 [22, 38]来估算。为方便起见，我们定义有效系数矩阵

$$\mathbf{A}(t) \equiv -i\sum_{\gamma} g_\gamma(t)\mathbf{N}^{-1}\mathbf{M}_\gamma, \tag{6}$$

其中 $\mathbf{A}(t) \in \mathbb{C}^{N_\alpha \times N_\alpha}$，将方程（1）化简为一组 N_α耦合线性常微分方程：

$$\frac{d\boldsymbol{\alpha}(t)}{dt} = \mathbf{A}(t)\boldsymbol{\alpha}(t). \tag{7}$$

$\mathbf{A}(t)$ 的时间依赖性完全源自 LCU 分解中的系数 $g_\gamma(t)$。当系数$g_\gamma(t)$ 平滑时，$\mathbf{A}(t)$ 也继承这种平滑性，下一小节介绍的谱离散化将利用这一点实现指数收敛。对于系数不连续或快速变化的哈密顿量，可以将演化区间划分为多个区段，使$\mathbf{A}(t)$ 在每个区段内保持平滑。

变分约化的效率在很大程度上取决于所选试探空间的维数。对于激发较少的系统，例如单电子问题或少通道碰撞过程，其物理可达子空间通常远小于希尔伯特空间的完整维数 2^{N_Q}，因此变分压缩也相应地十分有效。在更复杂的情形下，例如强关联或高度纠缠的多体系统，N_α 可能迅速增大，从而削弱变分投影在实践中的优势。该框架对这类情形的适用性仍是一个开放问题。本文采用简化累积 K 阶矩拟设，以系统地覆盖动态可达子空间；不过，其他选择，例如基于占据数的自然轨道截断，或依据物理激发通道构建的组态相互作用态，其有效性也可能取决于具体系统 [39–41]。

值得注意的是，先前基于变分原理的方法 [16, 22, 38]在通过量子计算获得方程（7）中的矩阵元后，通过经典计算机求解该方程以获得变分参数 $\boldsymbol{\alpha}$（t）。我们在以下小节中提出一种方法，通过谱离散化和量子线性系统求解器，利用量子计算求解方程（5）。该方法避免了经典反馈，从而为模拟含时哈密顿量的动力学提供了一种全量子方案。

B. 谱离散化

将含时薛定谔方程化为一组降阶线性常微分方程后，我们现在使用切比雪夫谱方法 [42]对所得动力学进行离散化。谱离散化尤其适用于时间依赖关系平滑的问题，因为它具有指数收敛性，并能实现高效的时间演化编码 [43]。

为确保数值稳定性并控制系数矩阵的谱范数，我们将总演化区间 $[0, T]$ 划分为 N_τ 个子区间：

$$[0, T] = [T_0, T_1] \cup [T_1, T_2] \cup \cdots \cup [T_{N_\tau - 1}, T_{N_\tau}], \tag{8}$$

其中 $T_0 = 0$ 且 $T_{N_\tau} = T$。每个子区间 $[T_h, T_{h+1}]$ 通过以下映射重新缩放到标准切比雪夫域 $[-1, 1]$：

$$K_h : t \mapsto t' = 1 - \frac{2(t - T_h)}{T_{h+1} - T_h}, \tag{9}$$

其满足 $K_h(T_h) = 1$ 和 $K_h(T_{h+1}) = -1$。在此重新缩放下，我们有 $\boldsymbol{\alpha}_h(t') = \boldsymbol{\alpha}(t)$，而第 h 个子区间上的演化方程为

$$\frac{d\boldsymbol{\alpha}_h(t')}{dt'} = \mathbf{A}_h(t')\boldsymbol{\alpha}_h(t'), \tag{10}$$

其中系数矩阵按如下方式缩放

$$\mathbf{A}_h(t') \equiv \frac{T_h - T_{h+1}}{2} \cdot \mathbf{A}(t). \tag{11}$$

这里，我们通过设置 $\boldsymbol{\alpha}_0(1) = \boldsymbol{\alpha}(0)$ 和 $\boldsymbol{\alpha}_{h+1}(1) = \boldsymbol{\alpha}_h(-1)$，在子区间边界处强制保证连续性。

子区间边界 $\{T_h\}$ 的选择会影响计算成本和数值稳定性。对于均匀分段，要确保每个子区间上满足 $\|\mathbf{A}_h(t')\| \leq 1$ 的一个充分条件为 [5]:

$$\frac{T}{2N_\tau} \cdot \max_{t \in [0,T]} \|\mathbf{A}(t)\| \leq 1. \tag{12}$$

然而，当 $\|\mathbf{A}(t)\|$ 随时间显著变化时，均匀分段可能会依据最坏情况范数划分出过多的子区间。为提高效率，我们采用自适应分段策略 [15], ，根据累积范数对区间进行划分：

$$\int_{T_h}^{T_{h+1}} \frac{1}{2}\|\mathbf{A}(t)\|dt = \frac{1}{2N_\tau}\int_0^T \|\mathbf{A}(t)\|dt \leq 1. \tag{13}$$

这种自适应策略通过在 $\|\mathbf{A}(t)\|$ 较大的区域分配较短的子区间、在其较小的区域分配较长的子区间，来集中利用计算资源。因此，在保持较高精度的切比雪夫逼近且展开次数适中的同时，它通常能够减少所需子区间的总数。

时间域划分后，我们在每个子区间上使用切比雪夫插值来近似解 $\boldsymbol{\alpha}_h(t')$。具体而言，向量 $\boldsymbol{\alpha}_h(t')$的每个分量 $\alpha_{h,i}(t')$都展开为次数为n的切比雪夫基：

$$\alpha_{h,i}(t') = \sum_{k=0}^{n} c_{h,i,k} T_k(t'), \tag{14}$$

其中

$$T_k(t') = \cos(k \arccos t'), \tag{15}$$

为第一类切比雪夫多项式，$\{c_{h,i,k}\}$ 为展开系数。为离散化

动力学，我们在切比雪夫-高斯-洛巴托配点 $\{t'_l = \cos(\frac{l\pi}{n})\}_{l=0}^{n}$处施加方程（ $\{c_{h,i,k}\}$10），从而得到一个用于确定系数的离散线性方程组。这一配点过程给出了每个子区间上变分动力学的谱离散形式。在下一小节中，我们将构造该离散线性系统的两种形式，包括全局形式和序贯变体，并讨论它们在量子实现方面各自的权衡。

C. 线性系统构造

上一小节所述的配点过程会在每个时间子区间上生成一个离散线性方程组。现在，我们将这些方程重新组织为两种互补的形式，以适应不同的量子资源配置。第一种称为全局线性方法 [42]，，它通过量子态将所有子区间上的演化编码到一个大型全局线性系统中。第二种称为序贯线性方法，是对全局线性方法的推广。需要指出的是，这种推广并非简单的扩展。在这种方法中，每个子区间都独立编码在量子态中，从而能够更灵活地分配资源并进行模块化量子执行。全局形式中采用代数运算进行的最终后处理可以省去。

1. *Global linear system*

为了通过一次量子测量获得完整的时间演化，可以按照参考文献 [42]，提出的方法，同时对所有 N_τ子区间上的谱离散化进行编码，从而构造一个全局线性系统。该形式既包含 Chebyshev-Gauss-Lobatto 节点处的配点方程，也包含连接相邻时间段的连续性约束。由此得到如下形式的结构化全局线性系统 [42]

$$\mathbf{L}|X\rangle = |B\rangle \tag{16}$$

其中 $|X\rangle \in \mathbb{C}^{N_\tau \cdot N_\alpha \cdot (n+1)}$ 编码了所有时间子区间上的切比雪夫展开系数 $\{c_{h,i,k}\}$，而 $|B\rangle$ 则嵌入了初始条件。这两个向量均表示为量子态，可自然地编码在多个寄存器中，从而能够应用量子线性系统算法（ QLSAs）。

我们将方程（16）的全局解向量定义为

$$|X\rangle = \sum_{h=0}^{N_\tau-1}\sum_{i=0}^{N_\alpha-1}\sum_{k=0}^{n} c_{h,i,k}|h\rangle|i\rangle|k\rangle \tag{17}$$

其中，$c_{h,\,i,\,k}$ 表示区间 h上分量 i的第 k个切比雪夫系数。 $|h\rangle\otimes|i\rangle\otimes|k\rangle$ 表示三个寄存器中的状态，它们用于编码时间区间、向量 $\boldsymbol{\alpha}_h(t')$的分量以及 Chebyshev 展开的阶数。相应地，我们定义 $|B\rangle$为

$$|B\rangle = |0\rangle\left(\sum_{i=0}^{N_\alpha-1}\alpha_i(0)|i\rangle\right)|0\rangle \tag{18}$$

其中 $\alpha_i(0)$ 表示初始变分参数 i的第 $\boldsymbol{\alpha}$ 个分量，也作为第一个子区间上的边界条件。这里，左侧的 $|0\rangle$表示第一个寄存器处于基态，右侧的 $|0\rangle$ 表示第三个寄存器也处于基态。 $\sum_{i=0}^{N_\alpha-1}\alpha_i(0)|i\rangle$ 表示第二个寄存器的状态，用于编码N_α 变分参数 $\alpha_i(t)$ 在式 (3) 的时间$t=0$。

现在我们详细说明矩阵$\mathbf{L}$的结构。该矩阵通过局部插值约束和连续性条件耦合各子区间的动力学。具体而言，我们将$\mathbf{L}$分解为

$$\mathbf{L} = \sum_{h=0}^{N_\tau-1}|h\rangle\langle h|\otimes(\mathbf{L}_1+\mathbf{L}_2(\mathbf{A}_h)) - \sum_{h=1}^{N_\tau-1}|h\rangle\langle h-1|\otimes\mathbf{L}_3. \tag{19}$$

其中，对角块 $\mathbf{L}_1$ $+\mathbf{L}_2(A_h)$ 编码了各子区间内的配点方程，次对角块$\mathbf{L}_3$ 则保证相邻子区间之间的连续性，如图 1(a) 所示。算子$\mathbf{L}_1$ 定义如下：

$$\mathbf{L}_1 = \mathbf{I}_{N_\alpha}\otimes\left(|0\rangle\langle 0|\mathbf{P}_n + \sum_{l=1}^{n}|l\rangle\langle l|\mathbf{P}_n\mathbf{D}_n\right) \tag{20}$$

其中，$\mathbf{P}_n$ 是插值微分矩阵，满足$[P_n]_{k,\,l} = \cos\frac{kl\pi}{n}$ ，而 $\mathbf{D}_n$ 是谱微分矩阵，其非零元素定义为

$$[D_n]_{kl} = \frac{2l}{\sigma_k}, \quad k+l \text{ odd}, l>k \tag{21}$$

其中，对于 $k \in \{1,2,\cdots,n\}$，有 $\sigma_0 = 2$ 和 $\sigma_k = 1$。它们的乘积$\mathbf{P}_n\mathbf{D}_n$ 将切比雪夫展开系数 $\{c_{h,i,k}\}$映射为时间导数的系数，从而在系数空间中实现谱微分。第二个分量$\mathbf{L}_2(\mathbf{A}_h)$ 则纳入了在切比雪夫节点 t'_l处取值的重缩放系数矩阵：

$$\mathbf{L}_2(\mathbf{A}_h) = -\sum_{l=1}^{n}\mathbf{A}_h(t'_l)\otimes|l\rangle\langle l|\mathbf{P}_n, \tag{22}$$

其中 $\mathbf{A}_h(t'_l) = \sum_{i_1}^{d-1}{}_{,\ i_2=0}A_h(t'_l)_{i_1+1,\ i_2+1}|i_1\rangle\langle i_2|$，其中$A_h(t'_l)_{i_1+1,\ i_2+1}$ 表示矩阵 $A_h(t'_l)$ 的第（i_1+1）行、第（i_2+1）列元素，定义如下

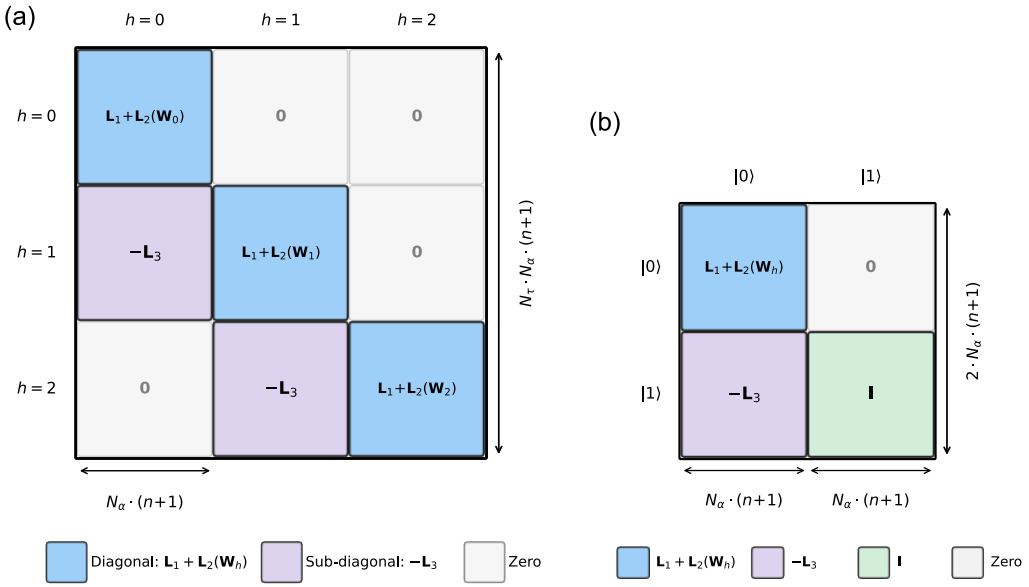

图 1. 两种线性系统表述中系数矩阵的分块结构。(a) 全局矩阵 $\mathbf{L}$ 呈现分块下三角结构，此处以 $N_\tau = 3$ 个子区间为例。对角块 $\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2(\mathbf{A}_h)$ 编码各子区间内的配点方程和初始条件，而次对角块 $-\mathbf{L}_3$ 则确保相邻子区间之间的连续性。每个块的维度为 $N_\alpha(n+1)$。(b) 单个子区间的序贯矩阵 $\mathbf{L}_h$ 具有由索引量子比特标记的 2×2 分块结构。左上块 $\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2(\mathbf{A}_h)$ 实现谱配点方程，维度为 $N_\alpha(n+1)$。左下块 $-\mathbf{L}_3$ 从切比雪夫系数中提取端点值。右下块 $\mathbf{I}$ 保留提取的状态，维度为 $N_\alpha(n+1)$。

见式（11）。最后， L_3 通过将区间 $h-1$ 的端点信息传递至初始区间 h，实现相邻分段之间的连续性条件：

$$\mathbf{L}_3 = \sum_{i=0}^{N_\alpha-1} \sum_{k=0}^{n} (-1)^k |i\rangle\langle i| \otimes |0\rangle\langle k|, \tag{23}$$

其实现了 $\alpha_{h,i}(-1) = \sum_{k=0}^{n} (-1)^k c_{h,i,k}$，利用了性质 $T_k(-1) = (-1)^k$。提取的状态用作后续区间的初始条件 $\alpha_{h+1,i}(1)$，从而确保近似解在区间边界处连续。

由此得到的线性系统为整个演化提供了全局编码，其理想结构有利于理论分析和资源估算。然而，其维度会随着子区间数量和谱分辨率的增加而迅速增大，因此更适用于低维问题，或作为量子线性系统算法的概念基础。此外，最终通过量子计算求解全局线性方程后，仍需进行经典后处理，通过简单的代数运算，根据式（$\boldsymbol{\alpha}(t)$）中的切比雪夫系数重构式（3）所示的完整时间依赖轨迹14）。相比之下，量子-经典混合变分量子时间演化算法需要通过经典方法求解微分方程，这比在通过量子计算求解全局线性方程后进行简单的后处理代数运算更为困难。下面，我们将全局线性系统进一步推广为 [42] 序贯线性系统，从而能够在每个区段直接制备态并进行测量，避免经典后处理。

2. *Sequential linear system*

现在，我们提出一种序贯线性方法，通过逐个求解时间演化区间，避免全局线性方法中涉及代数运算的后处理。该方法仅利用上一步的局部信息向前推进解。具体而言，我们为每个子区间定义一个独立的线性系统，形式如下

$$\mathbf{L}_h |X_h\rangle = |B_h\rangle \tag{24}$$

将问题化简为 N_τ 个相互解耦的系统，每个系统的维度为 $2 \times N_\alpha(n+1)$，从而显著降低量子资源需求。每个区间对应的矩阵 $\mathbf{L}_h$ 具有如下分块结构形式

$$\mathbf{L}_h = |0\rangle\langle 0| \otimes [\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2(\mathbf{A}_h)] - |1\rangle\langle 0| \otimes \mathbf{L}_3 + |1\rangle\langle 1| \otimes \mathbf{I}, \tag{25}$$

其中$\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2(\mathbf{A}_h)$，以及$\mathbf{L}_3$ 分别定义于式（20）和（22）(23)，而$\mathbf{I}$ 表示 $N_\alpha(n+1)$维单位矩阵。这里，第一个寄存器引入一个索引量子比特，将$\mathbf{L}_h$ 划分为 2×2 个块，如图1(b)所示，其中，对角块 $|0\rangle\langle 0|$实现谱配点方程，非对角块

$|1\rangle\langle 0|$ 通过$\mathbf{L}_3$, 提取端点值，而对角块 $|1\rangle\langle 1|$ 保留提取的状态。

解向量 $|X_h\rangle$由两个分量组成:

$$|X_h\rangle = |0\rangle \sum_{i=0}^{N_\alpha-1}\sum_{k=0}^{n} c_{h,i,k}|i\rangle|k\rangle + |1\rangle \left(\sum_{i=0}^{N_\alpha-1} \alpha_{h,i}(-1)|i\rangle\right)|0\rangle, \tag{26}$$

其中第一项包含子区间 h 内的切比雪夫展开系数，第二项存储每个系数分量在 $t'=-1$ 处的端点值。子区间 h 的初始条件（表示为 $|B_h\rangle$）形式如下

$$|B_h\rangle = |0\rangle \left(\sum_{i=0}^{N_\alpha-1} \alpha_{h-1,i}(-1)|i\rangle\right)|0\rangle. \tag{27}$$

这种构造使解能够在区间边界之间无缝传播。通过将解状态$|X_h\rangle$ 投影到索引子空间 $|1\rangle$并进行后选择，可以直接提取编码了$\boldsymbol{\alpha}_h(-1)$ 的归一化量子态，作为 $|B_{h+1}\rangle$后续区间的输入，无需额外的经典处理。该投影会在每个子区间内自动确保归一化，从而保证传播的量子态在整个序贯演化过程中始终保持适当归一化。如果后选择的成功概率不足，可以采用振幅放大 [44] 来提高成功概率。

总而言之，对于全局线性方法和序贯线性方法，QLSA 的输出编码在变分参数空间中，而非整个希尔伯特空间中。两种方法在提取变分参数的方式上有所不同。全局方法需要通过经典切比雪夫求和，从展开系数中重构 $\boldsymbol{\alpha}(t)$，而序贯方法则直接给出 $\boldsymbol{\alpha}_h(-1)$ 在 $|1\rangle$块中的端点值 $|X_h\rangle$。无论哪种方法，一旦得到 $\boldsymbol{\alpha}(t)$，便可通过拟设重构物理态，如式（3）所示。

序贯形式将全局时间演化分解为一系列较小且彼此解耦的线性方程，每个方程对应一个子区间。通过利用局部初始条件逐步推进解，它消除了全局耦合和经典后处理的需求。这种模块化结构显著降低了量子电路深度和内存需求，使其更适用于近期量子设备。

III. 量子算法实现

量子算法用于求解式（16）和式（24）中定义的线性方程组。目前，已有多种量子算法被提出用于求解线性方程组，包括基于 HHL算法的方法 [45–47], 基于量子线性代数的方法 [48], 以及基于量子信号处理的方法 [49–51]。在我们的情形中，矩阵 $\mathbf{L}$或 $\mathbf{L}_h$ （如式（19）和式（25）所示）通常是非厄米矩阵；因此我们发现，量子奇异值变换算法 [50, 51] 最适合求解由谱离散化过程构造的线性方程。

我们首先介绍量子奇异值变换算法及其量子电路实现。对于矩阵表示中大小为 N_L 、作用于 n_L 个量子比特的任意算子$\mathbf{L}$ ，其矩阵表示的奇异值分解为

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^{N_L} \sigma_i |v_i\rangle\langle w_i|, \tag{28}$$

其中，向量集 $\{|v_i\rangle\}$ 和 $\{|w_i\rangle\}$ 各自构成一组完备向量。量子奇异值变换的主要目的是实现算子$\mathcal{P}(\mathbf{L})$，它是一个d阶矩阵的多项式函数，定义为

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(\mathbf{L}) &= \sum_{i=1}^{N_L} \mathcal{P}(\sigma_i)|v_i\rangle\langle w_i| \\ &= \sum_{i=1}^{N_L} \left(\sum_{j=0}^{d} a_j \sigma_i^j\right)|v_i\rangle\langle w_i|,\end{aligned} \tag{29}$$

其中， $\{a_0, a_1, \cdots, a_d\}$ 的集合是定义多项式函数 $\mathcal{P}(\cdot)$的参数集合。

为了实现算子 $\mathcal{P}(\mathbf{L})$，在一个复合系统上定义另外两个算子，该系统包含 n_L 个系统量子比特和 1 个辅助量子比特，如图 2所示。首先，定义算子 U 如下

$$U = \begin{pmatrix} \mathbf{L} & \sqrt{1-\mathbf{L}\mathbf{L}^\dagger} \\ \sqrt{1-\mathbf{L}^\dagger\mathbf{L}} & -\mathbf{L}^\dagger \end{pmatrix}, \tag{30}$$

它是一个酉矩阵，用作矩阵 $\mathbf{L}$ 的块编码。块 $\sqrt{1-\mathbf{L}\mathbf{L}^\dagger}$ 定义为

$$\sqrt{1-\mathbf{L}\mathbf{L}^\dagger} = \sum_{i=1}^{N_L} \sqrt{1-\sigma_i^2}|v_i\rangle\langle v_i|, \tag{31}$$

块 $\sqrt{1-\mathbf{L}^\dagger\mathbf{L}}$ 定义为

$$\sqrt{1-\mathbf{L}^\dagger\mathbf{L}} = \sum_{i=1}^{N_L} \sqrt{1-\sigma_i^2}|w_i\rangle\langle w_i|. \tag{32}$$

需要注意的是， U 此定义要求矩阵 $\mathbf{L}$的所有奇异值 $\{\sigma_i\}$ 均小于或等于 1。否则，应使用归一化因子 α对矩阵 $\mathbf{L}$进行归一化，使$\mathbf{L}/\alpha$ 的最大奇异值小于或等于 1。在这种情况下，算子 U 应定义为

$$U = \begin{pmatrix} \mathbf{L}/\alpha & \sqrt{1-\mathbf{L}\mathbf{L}^\dagger/\alpha^2} \\ \sqrt{1-\mathbf{L}^\dagger\mathbf{L}/\alpha^2} & -\mathbf{L}^\dagger/\alpha \end{pmatrix}, \tag{33}$$

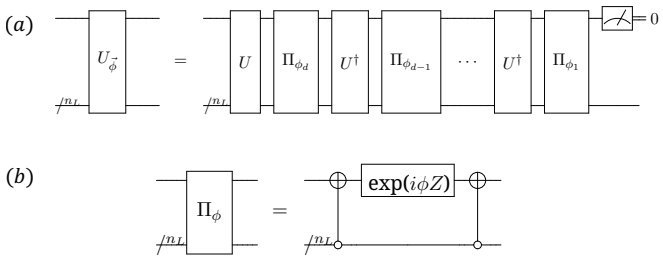

图 2. 利用量子电路实现量子奇异值变换算法。(a) 算子 $U_{\boldsymbol{\phi}}$ 的实现，假设阶数 d 为偶数。(b) 每个投影算子控制的相移算子 Π_ϕ 的实现。

从而确保算子 U 仍为酉矩阵。

接下来，定义投影算子控制的相移算子 Π_ϕ 为

$$\Pi_\phi = I \otimes \exp\left(i\phi\left(2|0\rangle\langle 0| - I\right)\right), \tag{34}$$

它是作用于系统量子比特、绕 z 轴旋转的旋转算子。给定算子 U 和 Π_ϕ，对于一系列相位因子 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \phi_2, \cdots, \phi_d)$，定义算子 $U_{\boldsymbol{\phi}}$ 为

$$U_{\boldsymbol{\phi}} = \Pi_{\phi_1} U \Pi_{\phi_2} U^\dagger \cdots \Pi_{\phi_{d-1}} U^\dagger \Pi_{\phi_d} U \tag{35}$$

当 d为奇数时，且

$$U_{\boldsymbol{\phi}} = \Pi_{\phi_1} U^\dagger \Pi_{\phi_2} U \cdots \Pi_{\phi_{d-1}} U^\dagger \Pi_{\phi_d} U \tag{36}$$

当 d为偶数时。通过根据集合 $\{a_0, a_1, \cdots, a_d\}$ 适当选择相位因子序列 $\boldsymbol{\phi}$，其中这些参数用于定义多项式函数$\mathcal{P}(\cdot)$，算子 $U_{\boldsymbol{\phi}}$ 是算子$\mathcal{P}(\mathbf{L})$ 的块编码，其形式为

$$U_{\boldsymbol{\phi}} = \begin{pmatrix} \mathcal{P}(\mathbf{L}) & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \tag{37}$$

以及算子

$$\langle 0|U_{\boldsymbol{\phi}}|0\rangle = \mathcal{P}(\mathbf{L}) \tag{38}$$

是算子 $\mathcal{P}(\mathbf{L})$ 的一种实现。基于多项式函数 $\boldsymbol{\phi}$ 构造相位因子序列 $\mathcal{P}(\cdot)$ 可通过数学方法 [50]或数值优化 [52, 53]来完成。

利用量子电路实现量子奇异值变换的过程如图2所示。该量子电路包含 $n_L + 1$ 个量子比特。最上方的量子比特是初始化为状态$|0\rangle$的辅助量子比特，它有助于实现每个 U 和 Π_ϕ。底部的 n_L 个量子比特为系统量子比特，初始化为状态 $|\psi_{\text{in}}\rangle$。运行该电路后，在量子电路末端对辅助量子比特进行测量。若测量结果为0，则整个量子奇异值变换算法即告成功。在这种情况下，系统量子比特的输出状态 $|\psi_{\text{out}}\rangle$ 为

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \frac{\mathcal{P}(\mathbf{L})|\psi_{\text{in}}\rangle}{\| \mathcal{P}(\mathbf{L})|\psi_{\text{in}}\rangle \|}, \tag{39}$$

这表明，算子 $\mathcal{P}(\mathbf{L})$ 已得到实现。

接下来，我们说明如何利用量子奇异值变换方法求解线性方程组。为求解如式（$\mathbf{L}|X\rangle = |B\rangle$ （16）所示的线性方程组，需要实现算子 $\mathbf{L}^{-1}$，使得 $|X\rangle = \mathbf{L}^{-1}|B\rangle$。若多项式函数 $\mathcal{P}$ 的阶数为 d，且能够近似函数 $f(x) = 1/x$，则

$$|\mathcal{P}(x) - \frac{1}{x}| = |\sum_{j=0}^{d} a_j x^j - \frac{1}{x}| < \frac{\epsilon}{N}, \forall \sigma_{min} \le x \le \sigma_{max}, \tag{40}$$

其中，σ_{min} 和 σ_{max} 分别表示矩阵$\mathbf{L}$的最小和最大奇异值，则有

$$\| \mathcal{P}(\mathbf{L}) - f(\mathbf{L}) \| \le \| \sum_{i=1}^{N} | \sum_{j=0}^{d} a_j \sigma_i^j - \frac{1}{\sigma_i} | |v_i\rangle\langle w_i| \| < \epsilon. \tag{41}$$

因此，矩阵 $\mathcal{P}(\mathbf{L})$ 的多项式函数可很好地近似算子 $f(\mathbf{L}) = 1/\mathbf{L}$。给定多项式函数 $\mathcal{P}(\cdot)$，随后应用量子奇异值变换算法来实现算子 $\mathcal{P}(\mathbf{L})$，并将系统寄存器的输入态设为 $|B\rangle$。若量子奇异值变换算法的过程成功，则根据式（39），输出态 $|\psi_{\text{out}}\rangle$满足

$$|\psi_{\text{out}}\rangle \propto \mathcal{P}(\mathbf{L})|B\rangle \approx \mathbf{L}^{-1}|B\rangle = |X\rangle. \tag{42}$$

因此，线性方程组的解已编码为量子态，并存储在系统量子比特中。量子奇异值变换完成了求解线性方程组的任务。

IV. 数值结果

通过模拟质子–氢碰撞中的电荷转移动力学，验证了所提出的方法。这是一个典型的含时量子化学问题。该系统非常适合作为基准，因为哈密顿量沿核轨迹平滑变化，但又并非平凡，同时其动力学由单个活性电子主导，并且可在完整希尔伯特空间的紧凑子空间中有效描述。我们首先说明物理模型及其量子计算表示，随后考察全局形式下的谱收敛性，最后验证其与序贯形式及显式量子电路模拟的一致性。

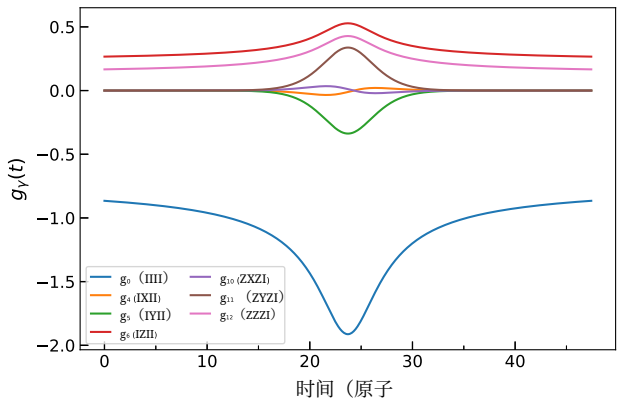

图 3. H $^+$ + $1s$ E = 10 $b = 1.6$ H( ) 在 keV 和原子单位下碰撞时，量子比特哈密顿量的代表性时变系数 $\{g_\gamma(t)\}$。图中展示了七个不同的系数，其余项具有相同的时间演化行为，为清晰起见未予展示。

我们考虑共振电荷转移过程 $\mathrm{H}^+ + \mathrm{H}(1s) \rightarrow \mathrm{H}(1s) + \mathrm{H}^+$，碰撞能量为 $E = 10$ keV，碰撞参数为 $b = 1.6$ a.u.，设置参照文献 [22]。入射质子沿经典直线轨迹 $\boldsymbol{R}(t) = \boldsymbol{b} + \boldsymbol{v}t$运动，电子则在由此产生的含时双中心库仑势下按量子力学规律演化。在该碰撞能量下，双态近似已足够，空间轨道空间截断为以每个原子核为中心的 $1s$ 态 [54]。电子结构采用 STO-3G（斯莱特型轨道-3 高斯）基组描述，并加入电子平移因子，以纳入原子轨道的非绝热运动 [55]。由此得到两个空间轨道；经自旋轨道展开后，形成四个自旋轨道。相应的含时量子比特哈密顿量采用式（2）的 LCU 形式，其中包含$N_Q = 4$ 个量子比特和 $N_\gamma = 13$ 个泡利项 [22]:

$$\begin{aligned} H(t) = {} & g_0(t) + g_1(t)X_0 + g_2(t)Y_0 + g_3(t)Z_0 + g_4(t)X_2 \\ & + g_5(t)Y_2 + g_6(t)Z_2 + g_7(t)Z_1X_0 + g_8(t)Z_1Y_0 \\ & + g_9(t)Z_1Z_0 + g_{10}(t)Z_3X_2Z_1 + g_{11}(t)Z_3Y_2Z_1 \\ & + g_{12}(t)Z_3Z_2Z_1, \end{aligned} \tag{43}$$

其中，系数 $\{g_\gamma(t)\}$ 在经过二次量子化和 Bravyi–Kitaev 变换后，继承了原始坐标空间哈密顿量平滑的时间依赖性；后者是一种标准的费米子到量子比特编码工具 [56]。代表性的系数动力学如图 3所示。由于 $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$对于 $t_1 \neq t_2$ 通常而言，演化无法简化为时间积分哈密顿量的简单指数形式，因此需要显式考虑时间序，这为谱离散化方案提供了一个非平凡的检验。

我们首先执行变分预处理步骤，以构建一个紧凑的动力学子空间。变分子空间由简化的累积 K矩拟设构建而成。对于当前的单活性电子系统，该过程生成 $N_\alpha = 4$个变分基态，使有效动力学维度从完整希尔伯特空间的维度 2^{N_Q} =16 降至大小为 $N_Q = 4$的子空间，如参考文献 [22]所述。这一显著的压缩比反映了单粒子碰撞动力学固有的低激发复杂度；在此过程中，只有少数电子通道参与电荷转移过程。

上述构造定义了一个紧凑但并非平凡的动力学问题，同时保留了碰撞过程的关键时间依赖性。下文将以质子–氢原子碰撞评估全局形式的性能，首先关注理想线性系统求逆极限下的收敛性和精度。随后，采用序贯形式分析显式量子电路实现的可行性和资源需求。

A. 变分谱离散化的数值精度

首先，我们在理想量子奇异值变换条件下，使用全局形式评估变分谱离散化框架。在本小节中，式（12）成立，并使用一个包含 7 个量子比特的时间寄存器对 $N_\tau = 2^7 = 128$ 个均匀子区间进行编码，覆盖整个演化区间 $[0, T]$。在固定 $N_\tau^{\mathrm{global}} = 128$和 $N_\alpha = 4$的情况下，将切比雪夫阶数从 $n = 1$ 变化至 7，以评估谱收敛性，从而得到维度为 $N_\tau^{\mathrm{global}} \times N_\alpha \times (n+1)$ 的全局线性系统。

时间依赖电荷转移概率定义为

$$P_n(t) = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} |\langle \Psi_{1s_{\mathrm{P}},\sigma} \mid \Psi_n(t) \rangle|^2 , \tag{44}$$

其中，$|\Psi_{1s_{\mathrm{P}},\ \sigma}\rangle$表示以入射质子为中心、具有自旋 $1s$的行进 σ 自旋轨道，而 $|\Psi_n(t)\rangle$是通过对$\mathbf{L}|X\rangle = |B\rangle$ 进行 n 阶切比雪夫拟合的全局解所获得的重构量子态。具体而言，首先由全局线性系统获得切比雪夫系数 $\{c_{h,\,i,\,k}\}$，再由此恢复时间依赖变分参数 $\alpha_i(t)$，随后将其映射回物理量子态 $|\Psi_n(t)\rangle$。作为参考，采用 QuTiP 计算精确量子动力学 [57]。

图 4（a）展示了时间依赖电荷转移概率的结果 $P_n(t)$，针对具有代表性的取值，例如 $n = \{1, 2, 3, 4, 7\}$，并与精确解进行比较。在 $n = 1$处，谱展开无法解析碰撞动力学，导致演化结果在定性上不正确，并严重低估了渐近概率。对于 $n = 2$，总体趋势得以捕捉，但渐近电荷转移概率仍存在较大误差。对于 $n \geq 3$，最近接近处附近的瞬态振荡行为以及

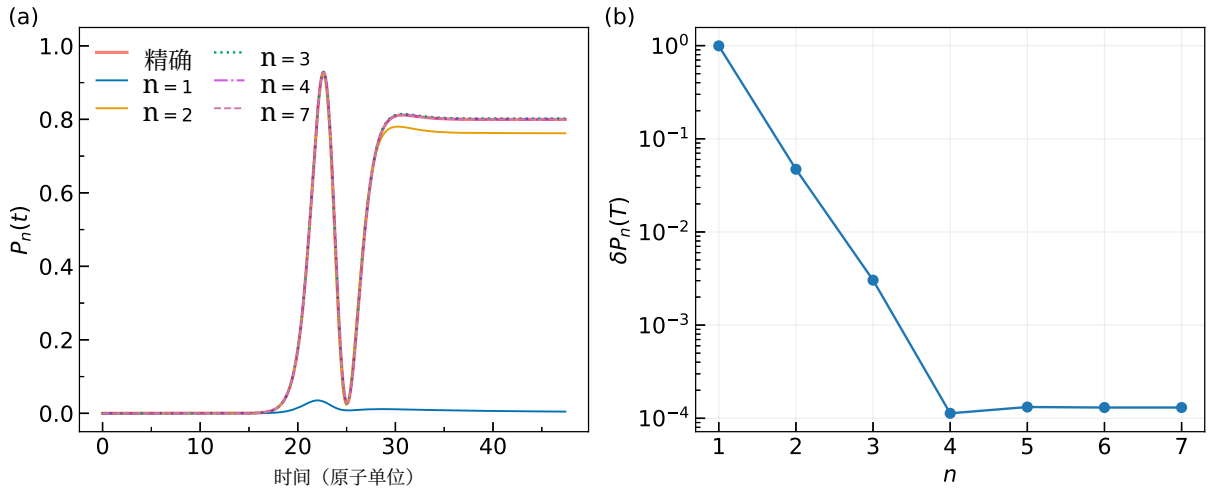

图4. $H^+ + H$ 电荷转移动力学的全局形式的谱收敛。(a) 切比雪夫阶数为 $n = 1$、2、3、4、7 时，随时间变化的电荷转移概率 $P_n(t)$，并与精确解进行比较。低阶展开（$n = 1$、2）无法捕捉渐近转移概率，而 $n \geq 3$ 能够准确再现瞬态动力学和长时极限。(b) 渐近电荷转移概率的相对误差 $\delta P_n(T)$ 随切比雪夫阶数 n 的变化。误差呈指数下降，直至 $n = 4$，之后饱和于 $\sim 10^{-4}$。

渐近极限都得到了精确再现。 $n = 4$ 和 $n = 7$ 的曲线在整个演化区间内与精确结果在视觉上均无法区分，并且还与经典-量子混合变分量子时间演化算法的结果一致 [22]。

谱离散化的收敛性在图4（b）中进行了量化。图中绘出了渐近相对误差

$$\delta P_n(T) = \frac{|P_n(T) - P_{\text{exact}}(T)|}{P_{\text{exact}}(T)} \tag{45}$$

随切比雪夫阶数 n变化，其中 T表示电荷转移概率已有效收敛时的最终模拟时间。误差从 $\mathcal{O}$（1）在 $n = 1$ 下降至 $\sim 10^{-4}$ 在 $n = 4$，呈近似指数下降，这与平滑动力学轨迹预期的谱收敛一致 [43]。对于 $n \geq 4$，误差饱和于$\sim 10^{-4}$，这表明在当前约化动力学表示下，进一步提高切比雪夫阶数已无法改善解。

为评估整个演化过程中的精度，而不仅是最终时刻的精度，图 5(a) 展示了态保真度

$$F_n(t) = |\langle \Psi_{\text{exact}}(t) \mid \Psi_n(t) \rangle|^2 \tag{46}$$

在切比雪夫阶数为 $n = 4$ 时获得。整个演化过程中，保真度始终高于 99。997%，并在最近接近时出现短暂的最低值，此时哈密顿量变化最快。碰撞区域之后，保真度略微偏离 1，这是全局形式中的轻微范数漂移所致。这种偏差纯属数值误差，源于缺少显式的中间归一化，而这正是全局线性系统构造中所缺少的。提高切比雪夫阶数可以系统地抑制这种偏差。例如，将切比雪夫阶数提高到 $n = 7$，可使整个演化过程中的保真度和范数偏差都降至 10^{-8} 水平。或者，即使固定为 $n = 4$，对全局态进行后验重归一化也能将保真度偏差抑制到 10^{-8} 水平，这表明 $n = 4$ 处的残余差异主要源于范数漂移，而非谱截断。这些结果展示了指数谱收敛，并证实全局变分谱离散化能够准确捕捉时间依赖碰撞动力学的瞬态和渐近特征。

B. 序贯形式与资源分析

接下来，我们考察序贯形式，以验证其与全局形式的一致性，并评估显式电路实现所需的量子资源。与上述全局形式的结果不同，此处通过显式的无噪声QSVT电路实现来评估序贯形式。对于同一个碰撞问题，将切比雪夫阶数固定为 $n = 4$，其谱收敛性已得到证实。在序贯形式中，采用基于式（13）的自适应时间分段，将子区间数量从 128 减少到 N_τ^{seq} =61。自适应分段使序贯形式所需的量子线性系统算法调用次数减半，从而直接降低了总测量成本。

如图 5（b）所示，

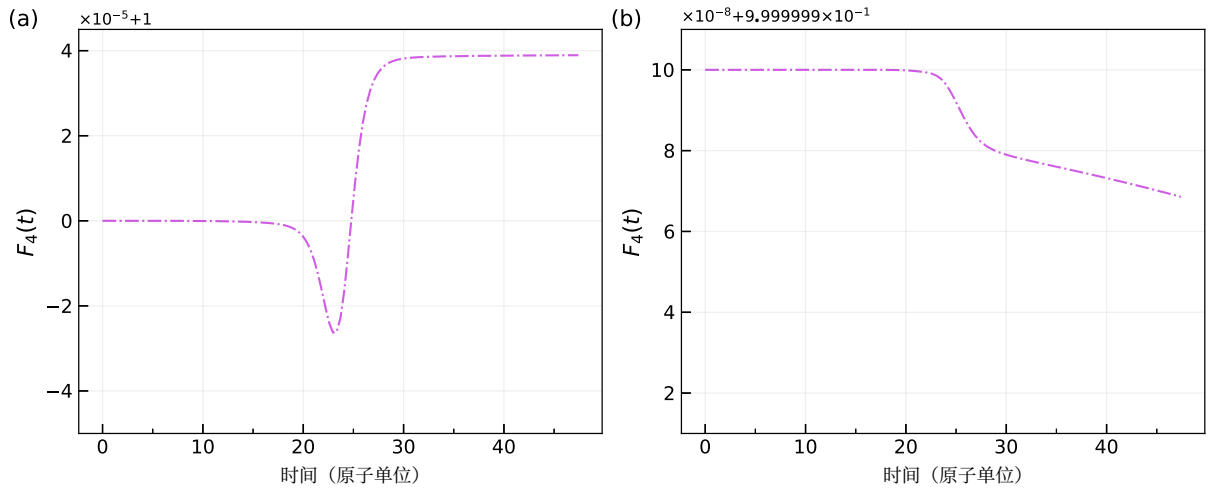

图 5. 切比雪夫阶数为 $n = 4$ 时 $H^+ + H$ 碰撞的态保真度。(a) 等分分段的全局形式。全局方案的保真度在 10^{-5} 量级出现偏差，并因缺少显式的中间归一化而表现出相应程度的范数漂移。(b) 采用自适应分段的序贯形式。序贯方案通过在每一步进行归一化来抑制范数漂移，并将保真度偏差维持在 10^{-8} 的量级。

在整个演化过程中，序贯解与精确解之间的态保真度始终保持在数值精度范围内的 1，证实了尽管两种形式具有不同的线性系统结构，但它们编码了等价的动力学。除复现全局态演化外，序贯形式还表现出更高的数值稳定性。这一改进源于序贯方案中固有的逐步归一化过程，该过程抑制了全局形式中观察到的范数漂移。对于 $n = 4$，序贯保真度偏差在整个演化过程中保持为$O(10^{-8})$，而全局解在最近接近时的偏差达到 $O(10^{-5})$ 量级。显式电路模拟采用次数为 $d = 1501$的 QSVT 多项式来近似$\mathbf{L}_h^{-1}$，精度接近机器精度。这对应于约 6006 层的 QSVT 电路深度，仅计入多项式变换，不包括块编码分解和态制备所带来的额外开销。所选次数 d 因此代表了对求解器的高精度压力测试，而不是经过实际优化的配置。与理论标度$d = \mathcal{O}(\kappa\log(\kappa/\epsilon)$一致，当中等精度 ϵ足够时 [51]，所需次数会大幅降低。

现在我们比较全局形式与序贯形式的量子资源需求。在全局形式中，所有 N_τ 子区间都耦合到一个维度为 $N_L^{\text{global}} = N_\tau N_\alpha(n+1)$ 的线性系统中。相应的量子寄存器需要 $\lceil \log_2 N_L^{\text{global}} \rceil$ 个系统量子比特，以及一个用于量子奇异值变换的辅助量子比特。相比之下，序贯形式求解 N_τ 个独立系统，每个系统的维度固定为$N_L^{\text{seq}} = 2N_\alpha(n+1)$，且与 N_τ 无关。总共需要$\lceil \log_2 N_L^{\text{seq}} \rceil + 1$ 个量子比特，其中 $\lceil \log_2 N_{\text{seq}\,L} \rceil$ 个量子比特用于编码线性系统（包括索引量子比特）定义于方程（25）中，另一个量子比特则用作量子奇异值变换辅助量子比特。因此，与全局构造相比，总量子比特数约减少 $\lceil \log_2 N_\tau \rceil$。

在序贯形式中，矩阵$\mathbf{L}_h$ 仅限于单个子区间，其条件数保持有界。相比之下，全局矩阵$\mathbf{L}$将所有子区间耦合为一个系统，其条件数通常会随系统规模增大。由于量子奇异值变换电路深度也按$\mathcal{O}(\kappa\log(\kappa/\epsilon))$缩放，有界的 κ_{seq} 确保每个序贯步骤都能以适中的电路深度实现，而全局形式则可能需要深得多的电路。具体而言，电路深度取决于条件数，而非直接取决于子区间的数量 N_τ。

两种形式在动力学信息如何分布于各次量子线性系统算法调用方面也有所不同。在全局形式中，整个轨迹被编码在单个量子态中，并通过一次量子线性系统算法调用后进行测量而获得。相比之下，序贯形式仅生成每个子区间的端点值，因此需要 N_τ 独立的量子线性系统算法调用和测量。因此，尽管由于有界的 κ_{seq}，每个序贯步骤的电路深度仍适中，但总计算成本随 N_τ线性增长。两种形式在结构上的主要区别总结于表 I。

为作具体说明，我们现在将上述一般分析应用于当前碰撞问题。在此问题中，变分维数为$N_\alpha = 4$，切比雪夫阶数为 $n = 4$；均匀分段采用 $N_\tau^{\text{global}} = 128$ 个子区间，而自适应分段则将其减至 $N_\tau^{\text{seq}} = 61$。在

均匀分段下，全局线性系统的维数为 2560，包含 QSVT 辅助量子比特在内需要 13 个量子比特，并通过一次量子线性系统算法调用求解。在序贯形式中，每个子区间对应一个维数为 40 的系统，需要 7 个量子比特；自适应分段将量子线性系统算法调用总数减至 61。对于此问题，$\kappa_{\mathrm{seq}} \approx 40$仍得到良好控制，而 κ_{global} 则显著更大，不过其确切值取决于具体问题。

总体而言，这两种形式各有优势，彼此互补。对于电路深度是首要限制的近期实现，采用自适应分段的序贯形式提供了一条切实可行的路径。对于能够支持更深电路的容错架构，全局形式则充分发挥了通过单次量子求解获得完整时间演化的优势。

V. 讨论与结论

在本研究中，我们结合变分子空间压缩、全局切比雪夫谱离散化和量子奇异值变换，提出了一种完全量子的方法来求解含时哈密顿量动力学。我们将经变分投影的 Schr¨odinger 方程重新表述为一个结构化静态线性系统，并通过 QSVT算法求解，从而避免显式构造时间有序传播子，并消除混合变分方法中固有的量子—经典反馈回路。全局构造和序贯构造均采用这一方程层面表述，区别仅在于谱系统的组织方式。全局实现通过将完整演化编码到单个相干线性问题中，构成了该方法的概念核心；序贯变体则重新组织这一结构，以缓解长时间模拟中的条件数效应。针对质子—氢电荷转移动力学的数值基准测试，验证了该框架的内部一致性和高精度表现。

从概念上看，本研究的表述将含时哈密顿量的量子动力学模拟重点从近似时间排序演化算子，转向在有限维投影子空间内求解离散化的动力学方程。时间依赖性通过谱展开吸收，从而将模拟任务简化为对结构化线性系统进行相干求逆，同时保留高精度态重构能力。从这个意义上说，我们的方法在变分投影技术与量子线性系统算法之间建立了结构性桥梁，为含时量子动力学提供了一种由方程驱动的替代路径。

原则上，本文方法适用于具有 LCU 表示且系数平滑变化的含时哈密顿量。除要求存在这种表示且系数平滑外，该方法不依赖特定的对称性、守恒量或对易结构，因此适用于一般的非对易动力学。这一设定涵盖了含时量子化学和原子物理学中的一大类问题；在这些领域中，具有平滑参数依赖关系的二次量子化哈密顿量自然出现。然而，该方法在实践中的有效性取决于是否存在能够捕捉相关演化的紧致投影子空间。对于单粒子或少通道系统，例如离子-原子碰撞、场驱动分子过程或受驱动的少能级动力学，可访问的子空间通常远小于完整的希尔伯特空间，因此降维在物理上是合理的。相比之下，对于呈现大规模纠缠增长的强关联多体系统，所需的拟设维数可能会不利地增长，变分压缩的优势也可能减弱。如何系统地为复杂系统构造紧致且具有丰富动力学表达能力的变分试探态，仍是一项有待解决的挑战。

未来工作的若干方向或可进一步提升当前方法的效率和适用范围。在算法方面，能够降低全局线性系统条件数的预处理策略将提高谱形式的可扩展性。在应用方面，针对更广泛时间依赖系统的进一步研究，将有助于界定我们方法在日益复杂的动力学场景中的实际适用范围。序贯形式的模块化结构天然兼容误差缓解技术，并可作为在早期容错量子处理器上开展近期实验演示的起点。最后，将我们的方法与自适应或问题定制试探态构造相结合，能够拓展可进行高效变分压缩的系统范围。

表I. 全局形式与序贯形式之间主要结构差异的总结。

	全局	序贯
线性系统维数	$N_\tau^{\mathrm{global}} \cdot N_\alpha(n+1)$	$2N_\alpha(n+1)$
QLSA调用	1	N_τ^{seq}
条件数标度	κ_{global}	κ_{seq}
输出	完整轨迹	单步

总之，本研究将含时哈密顿量的动力学模拟重新表述为一个全局约束的代数问题，而非一系列算符指数化。通过将变分投影动力学嵌入连贯的谱线性系统表述中，本研究推进了一种方程驱动方法，连接了含时哈密顿量模拟与量子线性系统算法，拓展了全量子方法的概念领域

动力学计算。

致谢

本研究得到量子科学与技术创新计划的资助，资助编号为编号为2021ZD0300200的项目，以及国家自然科学基金委员会资助的项目，编号为12374483和92365209。

[1] S. Lloyd, 《科学》273，1073（1996）。[2] A. Miessen、P. J. Ollitrault、F. Tacchino 和 I. Tavernelli, 《自然·计算科学》3，25（2023）。[3] A. M. Childs、D. Maslov、Y. Nam、N. J. Ross 和 Y. Su, 《美国国家科学院院刊》115，9456 2018( )。[4] G. H. Low 和 I. L. Chuang，Quantum 3，163（2019）。[5] A. M. Childs、Y. Su、M. C. Tran、N. Wiebe 和 S. Zhu, 《物理评论X》11，011020（2021）。[6] J. Eichler, *Lectures on ion-atom collisions: from nonrelativistic to relativistic velocities* 2005 (爱思唯尔，)。[7] B. Shi 和 F. Mintert，Physical Review Research 6，023097 2024( )。[8] T. Helgaker、P. Jorgensen 和 J. Olsen, *Molecular electronic-structure theory* 2013 (约翰·威立父子出版公司，)。[9] N. T. Maitra, 《化学物理学杂志》144（2016）。[10] I. S. Wahyutama 和 H. R. Larsson, Journal of Chemical Theory and Computation 20，9814（2024）。[11] D. Dong 和 I. R. Petersen, 《IET控制理论与应用》4，2651（2010）。[12] C. Chen、L.-C. Wang 和 Y. Wang, 《科学世界杂志》2013，869285（2013）。[13] I. Khalid、C. A. Weidner、E. A. Jonckheere、S. G. Schirmer 和 F. C. Langbein，Physical Review Research 5，043002（2023）。[14] W. Fritsch 和 C. D. Lin, 《物理学报告》202，1（1991）。[15] D. An、D. Fang 和 L. Lin，Quantum 6，690（2022）。[16] K. Bharti 和 T. Haug，Physical Review A 104，042418（2021）。[17] T. Haug 和 K. Bharti, 《量子科学与技术》7，045019（2022）。[18] J. W. Z. Lau、T. Haug、L.-C. Kwek 和 K. Bharti，SciPost Physics 12，122（2022）。[19] X. Yuan、S. Endo、Q. Zhao、Y. Li 和 S. C. Benjamin，Quantum 3，191（2019）。[20] Y.-X. Yao、N. Gomes、F. Zhang、C.-Z. Wang、K.-M. Ho、T. Iadecola 和 P. P. Orth，PRX Quantum 2，030307（2021）。[21] S. McArdle、T. Jones、S. Endo、Y. Li、S. C. Benjamin 和 X. Yuan, 《npj量子信息》5，75（2019）。[22] M. Qiao 和 Y.-x. Liu, 《物理评论A》112，062620（2025）。[23] J. Huyghebaert 和 H. De Raedt, 《物理学杂志A：数学与通论》23，5777（1990）。[24] M. Suzuki, 《日本学士院纪要B辑》69，161（1993）。[25] J. L. Bosse、A. M. Childs、C. Derby、F. M. Gambetta、A. Montanaro 和 R. A. Santos, 《自然通讯》16，2673（2025）。[26] G. H. Low 和 N. Wiebe，arXiv预印本 arXiv:1805.00675（2018）。[27] M. Kieferov´a、A. Scherer 和 D. W. Berry，Physical Review A 99, 042314（2019）。[28] D. W. Berry 和 P. C. Costa，Quantum 8，1369（2024）。[29] S. Blanes、F. Casas、J.-A. Oteo 和 J. Ros, 《物理学报告》470，151（2009）。[30] P. A. M. Casares、M. S. Zini 和 J. M. Arrazola，Quantum 8，1567（2024）。[31] D. W. Berry、A. M. Childs、Y. Su、X. Wang 和 N. Wiebe，Quantum 4，254（2020）。[32] C.-K. Lee、J. W. Zhong Lau、L. Shi 和 L. C. Kwek，Journal of Chemical Theory and Computation 18，1347（2022）。[33] A. Tranter、P. J. Love、F. Mintert 和 P. V. Coveney，Journal of chemical theory and computation 14，5617（2018）。[34] E. Van Den Berg 和 K. Temme，Quantum 4，322（2020）。[35] G. B. Mbeng、A. Russomanno 和 G. E. Santoro，SciPost Physics Lecture Notes，082（2024）。[36] C. Schweizer、F. Grusdt、M. Berngruber、L. Barbiero、E. Demler、N. Goldman、I. Bloch 和 M. Aidelsburger，Nature Physics 15，1168（2019）。[37] A. D. McLachlan，Molecular Physics 8，39（1964）。[38] K. Mitarai 和 K. Fujii，Physical Review Research 1，013006 2019( )。[39] A. E. DePrince III 和 C. D. Sherrill，Journal of chemical theory and computation 9，293（2013）。[40] L. Hackl、T. Guaita、T. Shi、J. Haegeman、E. Demler 和 J. I. Cirac，SciPost Physics 9，048（2020）。[41] F. Kossoski 和 P.-F. Loos，Journal of Chemical Theory and Computation 19，2258（2023）。[42] A. M. Childs 和 J.-P. Liu，Communications in Mathematical Physics 375，1427（2020）。[43] L. N. Trefethen, *Approximation theory and approximation practice extended edition* 2019 ，（SIAM，）。[44] G. Brassard、P. Hoyer、M. Mosca 和 A. Tapp, arXiv 预印本 quant-ph/0005055（2000）。[45] A. W. Harrow、A. Hassidim 和 S. Lloyd，Physical review letters 103，150502（2009）。[46] L. Wossnig、Z. Zhao 和 A. Prakash，Physical review letters 120，050502（2018）。[47] A. M. Childs、R. Kothari 和 R. D. Somma，SIAM Journal on Computing 46，1920（2017）。[48] Z.-M. Li 和 Y.-x. Liu，Physical Review A 112，032410（2025）。[49] G. H. Low 和 I. L. Chuang，Physical review letters 118，010501 2017( )。[50] A. Gily´en、Y. Su、G. H. Low 和 N. Wiebe in *Proceedings of the 51st annual ACM SIGACT symposium on theory of computing* 2019 193 204 ( ) pp. –。[51] J. M. Martyn 、 Z. M. Rossi 、 A. K. Tan 和 I. L. Chuang，PRX quantum 2，040203（2021）。[52] J. Haah，Quantum 3，190（2019）。[53] Y. Dong、X. Meng、K. B. Whaley 和 L. Lin，Physical

Review A **103**，042419（2021）。[54] R. McCarroll，伦敦皇家学会会刊 A辑：数学与物理科学 **264**，547（1961）。[55] D. R. Bates 和 R. McCarroll，伦敦皇家学会会刊 A辑：数学与物理科学

《科学》**245**, 175（1958）。[56] S. B. Bravyi 和 A. Y. Kitaev，《物理学年鉴》**298**, 210 2002( )。[57] J. R. Johansson、P. D. Nation 和 F. Nori，《计算机物理通讯》**183**,1760（2012）。