arXiv:2603.28624v1 [quant-ph] 30 Mar 2026

量子黎曼哈密顿下降

Yoshihiko Abe[1, 2, 3*] 和 Ryo Nagai[3, 4†],

[1]日本神奈川县横滨市，庆应义塾大学理工学研究科，邮编 *223-8522*[2]日本东京都，庆应义塾大学庆应义塾大学可持续量子人工智能中心（*KSQAIC*），邮编 *108-8345*[3]日本神奈川县横滨市港北区日吉 *3-14-1*，庆应义塾大学量子计算中心，邮编 *223-8522*[4]日本东京都国分寺市，日立株式会社研究与开发集团探索研究中心，邮编 *185-8601*

摘要

我们提出量子黎曼哈密顿下降（QRHD），这是一种用于黎曼流形上连续优化的量子算法。它通过在动能项中引入位置相关的度量，将参数空间的几何结构纳入考量，从而扩展了量子哈密顿下降（QHD）。我们分别在算符形式和路径积分形式下构建 QRHD，并推导出相应的量子运动方程。结果表明，量子修正会出现在作用量积分中，但在后期会受到时变耗散因子的抑制。这意味着，最优点附近的收敛由经典势控制，而量子效应会影响早期动力学。通过分析半经典方程，我们估算了收敛时间的下界，并通过数值实验展示 QRHD 在若干示例中能否作为量子优化算法发挥作用。我们还讨论了一种基于含时哈密顿量模拟的量子电路实现，并估算了其查询复杂度。

*yabe3@keio.jp
†ryo.nagai.jd@hitachi.com

目录

1 引言 12 量子哈密顿下降 33 量子黎曼哈密顿下降 5

4 收敛时间 9
4.1 QHD.94.2 QRHD.114.3 量子动力学的数值模拟.154.3.1 平坦情形.154.3.2 弯曲情形.15

5 实现　基于量子电路的实现及其复杂度　18
5.1 平坦情形.185.2 弯曲情形.19

6 结论 20

A 含时哈密顿量模拟的量子电路 21

B 几何约定 24
B.1 约定.25B.2 坐标 $\mathbb{S}^{N-1}$ .25

C 根据（半）经典运动方程估算收敛时间 26

1 引言

连续优化源于对现实世界系统的数学建模以及理论物理学方法，广泛存在于基础研究和包括人工智能在内的工程领域。作为连续优化的标准算法，经典梯度法在损失函数为非凸时，常常会停滞于局部极小值。为解决这一瓶颈，参考文献 [LHLW23] 的作者最近提出了一种名为量子哈密顿下降（QHD）的量子算法。在 QHD 中，待优化的参数被重新诠释为粒子在势中的位置，该势对应于损失函数，这与经典优化算法中的做法类似 [Ita13、SBC15、KBB15、WW15、WWJ16、WRJ16、SSZ21、WRJ21], ，而参数的更新则由量子力学系统的时间演化来描述。由于隧穿效应等量子效应，以及摩擦导致的能量耗散，粒子的波函数能够借助量子隧穿逃离局部极小值，并最终停留在使损失函数最小化的最优点。示意图见图1左图。从这个意义上说，QHD 利用量子动力学缓解经典优化中的停滞问题。

QHD 近年来作为一种能够摆脱局部解的新型连续优化算法，受到了广泛关注 [LHLW23, LZW23, CLW+25, LLPW24, KLP+24,

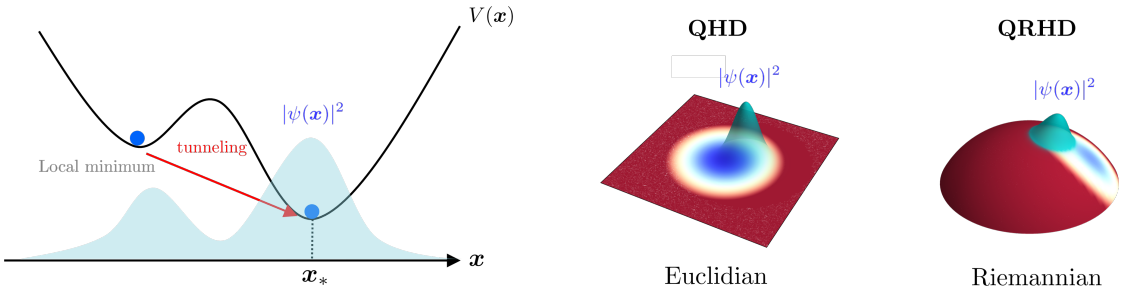


图 1：（左）利用量子动力学的量子优化算法示意图。蓝点和黑色曲线分别表示待优化的参数和损失函数的景观。浅蓝色区域表示参数的概率密度，该概率密度根据薛定谔方程随时间演化。量子隧穿使参数能够逃离局部极小值。（右）传统理念、QHD 与我们提出的 QRHD 之间的比较。QHD 在平坦空间的笛卡尔坐标系中进行参数搜索，而 QRHD 则能够在指定的黎曼流形上进行参数搜索。

CSW25，CHW+25，LWWZ25，LS25，PCSZ25]。从量子算法的角度来看，QHD 是一种相干量子算法，因为它不需要对量子态进行中间测量，也不需要根据测量结果更新状态。这种量子动力学无需仅通过量子电路来实现 [LHLW23，CLW+25，LLPW24]。在这方面，它有别于传统的量子-经典混合算法 [GAW19]。

尽管 QHD 作为一种有潜力解决局部极小值停滞问题的新型连续优化算法具有吸引力，但其形式本质上建立在笛卡尔坐标系上，其中哈密顿量具有正则动能项，因此缺乏融入关于参数空间的先验知识的自由度。这意味着，算法难以反映根据具体问题自然产生的参数空间几何结构，也难以反映适合高效优化的坐标系信息。

受此启发，我们提出了 QHD 的一种扩展，称为量子黎曼哈密顿下降（QRHD），使我们能够将此类几何信息作为先验知识纳入其中。示意图见图1右侧面板。在 QRHD 中，我们将 QHD 的动能项扩展为非正则形式，并引入一个新的自由度，即参数空间中的度量张量。通过恰当地选择该张量，可以选用笛卡尔坐标以外的一般坐标系。尽管这种扩展是通过修改动能项实现的，但隧穿等量子力学性质得以保留，因此 QHD 逃离局部极小值的能力也将保持不变。此外，在 QRHD 中，施加于参数空间的约束可通过度量自然地纳入，因此约束连续优化可以在同一框架下处理。QRHD 提供了一个扩展 QHD 的框架，在保留其量子优势的同时，将其应用范围拓展到更广泛的连续优化问题——即黎曼流形上的连续优化 [Ros60，Ros61，Lue72，Gab82，Smi14，Ama96，EAS98，ZS16，ZS18，AOBL19]。

本文其余部分安排如下。第2节简要回顾作为本文方案基础算法的 QHD。第3 节介绍 QHD 在黎曼流形上的连续优化扩展 QRHD，并讨论算符排序产生的一些量子几何修正。第4节介绍 QHD 和 QRHD 的路径积分形式，并通过分析量子运动方程，讨论收敛至局部极小值的典型时间。我们还展示一些简单示例的数值分析，以验证 QRHD 能否作为量子优化算法发挥作用。第5节将介绍如何通过量子电路实现 QRHD，并根据收敛时间的估计来评估其复杂度。第6 节总结全文。本文采用自然单位制，除非 $\hbar = 1$ 另有说明。

2 量子哈密顿下降

下面简要回顾一种名为 量子哈密顿下降（*QHD*） [LHLW23], 的量子算法，它构成了我们研究的基本概念。QHD 将待优化的参数视为在势场中运动的粒子的位置，而该势场对应于损失函数。优化通过量子力学时间演化实现。本节接下来的部分将从拉格朗日量及其经典动力学入手，然后转向通过 QHD 进行参数优化的量子动力学。

我们考虑在 N 维空间中，寻找连续可微损失函数 $V(\boldsymbol{x})$ 最小值点的问题，该空间记作 $\boldsymbol{x}_*$。粒子的位置坐标表示为 $\boldsymbol{x} = (x^1, \ldots\ldots, x^N)^{\mathrm{t}}$。对于这一优化问题，通常采用在 N 维空间中感受势 $V(\boldsymbol{x})$ 并具有速度黏滞的单点粒子动力学，其描述如下（经典）拉格朗日量

$$L(\boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{x}}, t) = a(t)\left(\frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^2 - \eta(t)V(\boldsymbol{x})\right), \tag{2.1}$$

其中，点表示对时间 t 的导数。我们将粒子速度的平方和记为 $\dot{\boldsymbol{x}}^2 = \sum_{i=1}^{N}(\dot{x}^i)^2$。 m 是粒子质量，并假设其为正 $m > 0$。 $V(\boldsymbol{x})$是实值函数，对应于点粒子动力学的势能。时变系数 $a(t)$ 和 $\eta(t)$ 是时间 t 的实函数，而 $a(t)$ 会产生该系统的耗散，如下所示。为简便起见，除非另有说明，我们省略这些量对时间的依赖，并记作 $\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{x}$、 $a(t) = a$ 和 $\eta(t) = \eta$ 。对 $\boldsymbol{x}$ 对式 (2.1) 求变分，得到运动方程（EOM）：

$$m\ddot{\boldsymbol{x}} + m\frac{\dot{a}}{a}\dot{\boldsymbol{x}} + \eta \operatorname{grad} V(\boldsymbol{x}) = 0\,, \tag{2.2}$$

这就是所谓的欧拉–拉格朗日方程。grad 表示梯度向量，即 grad $= (\partial_i, \ldots\ldots, \partial_N)^{\mathrm{t}}$，其中 $\partial_i = \partial/\partial x^i$。动能项系数的时变会在运动方程中产生摩擦，例如 $\frac{\dot{a}}{a}\dot{\boldsymbol{x}}$。

由此方程，我们讨论 a（t）和 η（t）在优化中的解释。的时间依赖性 a导致了带有摩擦项的能量耗散，如上文所述。该耗散项发挥着重要作用，使得优化中存在收敛过程。如果取 a（t） $= \mathrm{e}^{2\gamma t}$ 为正实数 γ，方程（2.2）与加速梯度法的参数更新规则的连续

极限一致，该方法被称为 Polyak 重球法；众所周知，梯度函数趋于驻点的收敛速度由 γ [SSZ21]刻画。关于的其他取值，参见例如文献 a： [Ita13、SBC15、KBB15、WW15、WWJ16、WRJ16、SSZ21、WRJ21]。方程（2.2）还表明，参数 $\boldsymbol{x}$ 由势梯度更新，而 η 作为 grad 的系数 V 被视为学习参数。

QHD [LHLW23]通过融入量子效应扩展了上述过程。由于隧穿效应等量子力学特征会纳入时间演化中，预计 QHD 将成为一种利用动力学进行优化的高效量子方法。

为了考虑系统的量子动力学，我们引入系统的正则形式（2.1）。[1] 共轭动量 $\boldsymbol{p} = (p_1, \ldots, p_N)^{\mathrm{t}}$ 定义为

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}} = a(t) m \dot{\boldsymbol{x}} \,, \tag{2.3}$$

而哈密顿量变为

$$H(t) = \sum_{i=1}^{N} p_i \dot{x}^i - L(\boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{x}}, t) = \frac{1}{a(t)} \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \right) + a(t)\eta(t) V(\boldsymbol{x}) \,, \tag{2.4}$$

其中 $\boldsymbol{p}^2 = \sum_{i=1}^{N} p_i^2$。为了转向量子理论，我们引入位置态 $|\boldsymbol{x}\rangle$及其对偶态 $\langle \boldsymbol{x}|$，满足[2]

$$\hat{\boldsymbol{x}} \, |\boldsymbol{x}\rangle = \boldsymbol{x} \, |\boldsymbol{x}\rangle \,, \qquad \int_{\mathbb{R}^N} \mathrm{d}^N \boldsymbol{x} \; |\boldsymbol{x}\rangle\langle \boldsymbol{x}| = I \,, \qquad \langle \boldsymbol{x} | \boldsymbol{x}' \rangle = \delta^N (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \,. \tag{2.5}$$

The 描述单粒子的量子态 $|\psi(t)\rangle$ 遵循薛定谔方程

$$\mathrm{i} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) \, |\psi(t)\rangle \,. \tag{2.6}$$

$\hat{}H(t)$ 是由经典哈密顿量（2.4）得到的哈密顿算符

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{a(t)} \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} \right) + a(t)\eta(t) V(\hat{\boldsymbol{x}}) \,. \tag{2.7}$$

坐标算符 $\hat{}\boldsymbol{x}$ 及其共轭动量算符 $\hat{}\boldsymbol{p}$ 满足正则对易关系

$$[\hat{x}^i, \hat{p}_j] = \mathrm{i} \delta^i_j \,. \tag{2.8}$$

要求动量算子具有厄米性，意味着在位置基中，$\hat{}\boldsymbol{p}$可以表示为微分算符

$$\hat{p}_i = -\mathrm{i} \frac{\partial}{\partial x^i} = -\mathrm{i} \partial_i \,. \tag{2.9}$$

[1]一般而言，当拉格朗日量显式依赖于时间 t时，系统不具有正则形式；然而，当能量耗散仅来源于与速度 $\dot{\boldsymbol{x}}$成正比的摩擦项时，则可以采用正则描述。[2]在讨论量子电路实现时，假定坐标 $\boldsymbol{x}$ 已进行适当离散化。

那么，位置基中的哈密顿算符（2.7）为

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{a(t)}\left(\frac{-\Delta}{2m}\right) + a(t)\eta(t)V(\hat{\boldsymbol{x}})\,. \tag{2.10}$$

这里， Δ 是定义为

$$\Delta = \sum_{i=1}^{N} \partial_i^2\,. \tag{2.11}$$

作为一种量子算法，可以对方程（2.10）执行哈密顿量模拟，并估计输出态的位置期望值 $|\psi\ (t)\ \rangle$，其形式为 $\langle \boldsymbol{x}\ (t)\ \rangle = \langle \psi\ (t)\ |\hat{}\boldsymbol{x}|\psi\ (t)\ \rangle$。适当选择 a 和 η，并使 t足够长时，$\langle \boldsymbol{x}\ (t)\ \rangle$ 应当趋近于所需的值 $\boldsymbol{x}_*$。

已有若干 QHD 的扩展方案被提出。其中包括向 $\operatorname{grad} V\ (\boldsymbol{x})$ 中加入类似热噪声的效应并引入随机参数更新的模型 [PCSZ25、Esc25], ，以及包含矢势贡献的公式 [LS25]。这些框架与 QHD 一样，利用量子动力学进行参数优化，并表明其性能可能优于经典连续优化算法。

QHD 及其扩展提供了一种新的连续优化框架，有望利用量子特性解决局部极小值停滞问题。然而，由于未体现参数空间的几何结构，将 QHD 直接应用于黎曼流形上的连续优化并不简单。在本工作中，我们提出了 QHD 的一种扩展，使其适用于黎曼流形上的连续优化。

3 量子黎曼哈密顿量下降

本节介绍我们提出的一种适用于黎曼流形上连续优化的量子算法，并将其称为量子黎曼哈密顿量下降（*QRHD*）。通过考虑弯曲空间中的单个点粒子动力学，可以将其视为 QHD 的自然延伸。

我们扩展拉格朗日量（2.1），纳入背景几何的影响，并考虑单个点粒子在 N维弯曲空间中的动力学，具体如下：

$$L(\boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{x}}, t) = a(t)\left(\frac{m}{2}\sum_{i,j=1}^{N} g_{ij}(\boldsymbol{x})\dot{x}^i\dot{x}^j - \eta(t)V(\boldsymbol{x})\right), \tag{3.1}$$

其中，$g_{ij}(\boldsymbol{x})$ 是关于 $\boldsymbol{x}$ 的可微函数，并假设为对称半正定矩阵。它被视为 N维空间的度量；在本文中，该空间被假设为 N维黎曼流形 $\mathcal{M}_N$。g_{ij} 的逆矩阵记为 g^{ij}，并满足

$$\sum_{j=1}^{N} g_{ij}(\boldsymbol{x})g^{jk}(\boldsymbol{x}) = \delta_i^k\,. \tag{3.2}$$

QHD 对应于这一特殊选择$g_{ij}(\boldsymbol{x})=\delta_{ij}$，它描述了平坦空间中的粒子力学。[3] 由（3.1），经典运动方程变为

$$m\left(\ddot{x}^i+\sum_{j,k=1}^{N}\Gamma^i_{jk}(\boldsymbol{x})\dot{x}^j\dot{x}^k\right)+m\frac{\dot{a}}{a}\dot{x}^i+\eta(\mathrm{grad}_g\,V(\boldsymbol{x})^i=0\,, \tag{3.3}$$

其中 $\Gamma^i_{jk}(\boldsymbol{x})$是列维-奇维塔联络，由$g_{ij}(\boldsymbol{x})$的导数给出，形式如下

$$\Gamma^i_{jk}(\boldsymbol{x})=\sum_{l=1}^{N}\frac{1}{2}g^{il}(\boldsymbol{x})\left(\partial_k g_{lj}(\boldsymbol{x})+\partial_j g_{ik}(\boldsymbol{x})-\partial_l g_{jk}(\boldsymbol{x})\right)\,. \tag{3.4}$$

式（3.3）中的前两项对应于流形上乘以质量的加速度向量。当 $a=0$ 且 $V=0$时，该加速度向量刻画了这一几何结构的测地线。[4] （$\mathrm{grad}_g\,V$）^{i} 定义为

$$(\mathrm{grad}_g\,V)^i\coloneqq\sum_{j=1}^{N}g^{ij}(\boldsymbol{x})\partial_j V(\boldsymbol{x})\,, \tag{3.5}$$

它是黎曼流形 V（$\boldsymbol{x}$）上的自然梯度 $\mathcal{M}_N$。于是，式（3.3）可视为粒子在黎曼流形上运动时的运动方程，其中包含自然梯度和能量耗散。适当选择g_{ij} ，即可在纳入参数空间几何结构先验信息的同时更新参数。

下面对式（3.1）所描述的动力学进行量子化。我们从经典动力学的正则形式出发，其中共轭动量定义为

$$p_i=\frac{\partial L}{\partial\dot{x}^i}=a(t)m\sum_{j=1}^{N}g_{ij}(\boldsymbol{x})\dot{x}^j\,, \tag{3.6}$$

哈密顿量为

$$H(t)=\sum_{i=1}^{N}p_i\dot{x}^i-L(\boldsymbol{x},\dot{\boldsymbol{x}},t)=\frac{1}{a(t)}\left(\frac{1}{2m}\sum_{i,j=1}^{N}g^{ij}(\boldsymbol{x})p_ip_j\right)+a(t)\eta(t)V(\boldsymbol{x})\,. \tag{3.7}$$

与平坦情形（2.4）相比，可以发现动能项中出现了逆度量。动能项中 $\boldsymbol{x}$ 的函数会在量子化过程中引发算符排序问题，因此需要谨慎处理。

本文采用与 QHD 类似的量子化过程，并考虑 $g^{ij}(\boldsymbol{x})$ 的出现以及算符排序。下面引入位置态 $|\boldsymbol{x}\rangle$ 及其对偶态 $\langle\boldsymbol{x}|$，它们满足与 QHD 类似的方程：

$$\hat{\boldsymbol{x}}\,|\boldsymbol{x}\rangle=\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{x}\rangle\ ,\quad\int_{\mathcal{M}_N}\mathrm{d}^N\boldsymbol{x}\sqrt{g(\boldsymbol{x})}\,|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|=I\,,\quad\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle=g(\boldsymbol{x})^{-\frac{1}{4}}\delta^N(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')g(\boldsymbol{x}')^{-\frac{1}{4}}\,, \tag{3.8}$$

[3]具有这种非正则动能项的物理模型称为非线性σ模型，并在广泛的领域中受到积极讨论。[4]从这个意义上说，也可以将当前算法理解为：它一致地执行一种操作，对应于经典计算机上的黎曼优化算法中使用的“回缩”。

其中 $g(\boldsymbol{x})$ 表示度量 $g(\boldsymbol{x})$ 的行列式 $=\det g_{ij}(\boldsymbol{x})$。$\int_{\mathcal{M}}$ 表示在参数空间 $\mathcal{M}_N$ 上的积分。值得注意的是，积分测度 $\mathrm{d}^N\boldsymbol{x}\sqrt{g(\boldsymbol{x})}$ 是点变换（一般坐标变换）下的不变体积元。方程（3.8）归一化条件中的因子 $g^{-1/4}(\boldsymbol{x})$ 源自下列关系的对称表示：

$$1=\int_{\mathcal{M}_N}\mathrm{d}^N\boldsymbol{x}\delta^N(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\int_{\mathcal{M}_N}\mathrm{d}^N\boldsymbol{x}\sqrt{g(\boldsymbol{x})}g^{-\frac{1}{4}}(\boldsymbol{x})\delta^N(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')g^{-\frac{1}{4}}(\boldsymbol{x}')=\int_{\mathcal{M}_N}\mathrm{d}^N\boldsymbol{x}\sqrt{g(\boldsymbol{x})}\left\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\right\rangle\,. \tag{3.9}$$

共轭动量算符 $\hat{}\boldsymbol{p}=(\hat{}p_1、\ldots\ldots、\hat{}p_N)^{\mathrm{t}}$ 也会因几何性质而发生改变。正则对易关系

$$[\hat{x}^i,\hat{p}_j]=\mathrm{i}\delta^i_j\,, \tag{3.10}$$

意味着 $\hat{}p_i=-\mathrm{i}\partial_i+f_i(\boldsymbol{x})$，其中使用实函数 $f_i(\boldsymbol{x})$。动量算子在 $\mathcal{M}$ 上的厄米性确定了其函数形式为 $f_i(\boldsymbol{x})=-(\mathrm{i}/4)g(\boldsymbol{x})^{-1}\partial_i g(\boldsymbol{x})$。因此，位置基中的动量算子为 [OS72]

$$\hat{p}_i=-\mathrm{i}\partial_i-\frac{\mathrm{i}}{4}g(\boldsymbol{x})^{-1}\partial_i g(\boldsymbol{x})=-\mathrm{i}\left(\partial_i+\frac{1}{2}\Gamma_i(\boldsymbol{x})\right)=g(\boldsymbol{x})^{-1/4}(-\mathrm{i}\partial_i)g(\boldsymbol{x})^{1/4}\,. \tag{3.11}$$

这里引入了 $\Gamma_i(\boldsymbol{x}):=\sum_{j=1}^N\Gamma^j_{ij}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\sum_{j,\ k}g^{jk}(\boldsymbol{x})\partial_i g_{jk}(\boldsymbol{x})$。

现在我们考虑该系统的量子态 $|\psi(t)\rangle$，以及由薛定谔方程给出的时间演化方程

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi(t)\right\rangle=\hat{H}(t)\left|\psi(t)\right\rangle\,. \tag{3.12}$$

$\hat{}$ 下一个问题是，哈密顿算符 $H(t)$ 具有何种形式。这可以根据位置基波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)=\langle\boldsymbol{x}|\psi(t)\rangle$ 的性质推导得出。根据（3.8）中的完备性条件，两个量子态的内积 $|\psi_1(t)\rangle$ 和 $|\psi_2(t)\rangle$ 变为

$$\langle\psi_1(t)|\psi_2(t)\rangle=\int_{\mathcal{M}_N}\mathrm{d}^N\boldsymbol{x}\sqrt{g(\boldsymbol{x})}\psi_1^*(\boldsymbol{x},t)\psi_2(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{3.13}$$

内积是一个标量，在坐标变换下保持不变；我们还指出，积分测度 $\mathrm{d}^N\boldsymbol{x}\sqrt{g(\boldsymbol{x})}$ 也保持不变。因此，我们发现，波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 在变换下表现为标量函数，而生成时间演化的哈密顿算符 $\hat{}H(t)$ 也保持不变。由此，弯曲空间量子系统的哈密顿算符具有以下形式 [Pod28,OS72]:

$$\hat{H}(t)=\frac{1}{a(t)}\left(\frac{-\Delta_g}{2m}\right)+a(t)\eta(t)V(\hat{\boldsymbol{x}})\,. \tag{3.14}$$

Δ_g 是流形 $\mathcal{M}$ 上的协变微分算符，由[5]定义

$$\Delta_g=\frac{1}{\sqrt{g(\boldsymbol{x})}}\sum_{i,j=1}^N\partial_i\sqrt{g(\boldsymbol{x})}g^{ij}(\boldsymbol{x})\partial_j=\sum_{i,j=1}^N g^{ij}(\boldsymbol{x})\left(\partial_i\partial_j-\sum_{k=1}^N\Gamma^k_{ij}\partial_k\right)\,, \tag{3.15}$$

[5]如果希望像参考文献 $A_i(\boldsymbol{x})$ 中那样添加一个对应于规范场的矢量场 [LS25], ，可以将方程 ∂_i （3.15）中的微分算符替换为 $\partial_i-\mathrm{i}eA_i(\boldsymbol{x})$ [DT88] ，这称为协变导数。这里， e 是一个称为规范耦合的常数。

它也称为拉普拉斯–贝尔特拉米算子 [Ros97]。

对于后一种用途，我们考虑对哈密顿算符（3.14）进行改写。利用动量算子（3.11），$\hat{H}(t)$ 可表示为

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{a(t)} \left(\frac{1}{2m} \sum_{i,j=1}^{N} g^{-1/4}(\hat{\boldsymbol{x}}) \hat{p}_i g^{ij}(\hat{\boldsymbol{x}}) \sqrt{g(\hat{\boldsymbol{x}})} \hat{p}_j g^{-1/4}(\hat{\boldsymbol{x}}) \right) + a(t)\eta(t)V(\hat{\boldsymbol{x}}) \,. \tag{3.16}$$

此外，还可以将其改写如下 [Miz75，DT88]:

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{a(t)} \left(\frac{1}{2m} \sum_{i,j=1}^{N} \left[g^{ij}(\hat{\boldsymbol{x}}) \hat{p}_i \hat{p}_j \right]_{\mathrm{W}} + \Delta V(\hat{\boldsymbol{x}}) \right) + a(t)\eta(t)V(\hat{\boldsymbol{x}}) \,. \tag{3.17}$$

$[\hat{\bullet}]_{\mathrm{W}}$ 表示算符乘积 $\hat{\bullet}$ 的 Weyl排序，这在讨论算子形式体系与路径积分形式之间的关系时经常使用。$\Delta V(\boldsymbol{x})$ 定义为 [Miz75，GJ76，Sak85]

$$\Delta V(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{8m} \left(-\mathcal{R}(\boldsymbol{x}) + \sum_{i,j,k,l=1}^{N} g^{ij}(\boldsymbol{x}) \Gamma^k_{il}(\boldsymbol{x}) \Gamma^l_{jk}(\boldsymbol{x}) \right) . \tag{3.18}$$

这里 $\mathcal{R}$ 表示定义如下的里奇标量

$$\mathcal{R} = \sum_{i,j,k=1}^{N} g^{ij} \left(\partial_k \Gamma^k_{ij} - \partial_i \Gamma^k_{kj} + \sum_{m=1}^{N} \left(\Gamma^k_{km} \Gamma^m_{ij} - \Gamma^k_{im} \Gamma^m_{kj} \right) \right) . \tag{3.19}$$

请注意，除了将式（ $\Delta V(\boldsymbol{x})$）中的经典变量朴素地提升为采用 Weyl排序的算符之外，还会出现几何量子修正 3.7。此外，该修正 ΔV 源于动能项中的排序，其显式时间依赖性为$1/a(t)$，这与 $\boldsymbol{p}^2$ 项相同。

作为一种算法，我们对含时哈密顿量（3.14）实施哈密顿量模拟，并按照与 QHD 相同的方式，利用输出态 $|\psi(t)\rangle$估计位置的期望值。适当选择 a 和 η，并使 t 足够长，就能使$\langle \boldsymbol{x}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{\boldsymbol{x}} | \psi(t) \rangle$ 趋近于所需的值 $\boldsymbol{x}_*$，其中 为函数的优化点$V(\boldsymbol{x})$。

正如本节所示，当前算法的关键特点是引入了额外的自由度 $g_{ij}(\boldsymbol{x})$，而在 QHD 中该自由度是平凡的。通过它，可以将参数空间的几何信息作为优化的先验信息纳入考虑。另一方面，当我们考虑由非平凡的$g_{ij}(\boldsymbol{x})$扩展而成的量子力学系统时，会出现与参数空间几何相关的量子修正，例如式（3.18）。这可能会改变点粒子的量子运动。在下一节中，我们将分析此类几何修正如何影响优化的动力学特征，例如收敛时间。

最后，我们讨论 QRHD 与虚时间演化之间的关系。将$\boldsymbol{x}$ 视为指定纯态的参数（振幅），并赋予参数流形复射影空间的结构，使其具有 Fubini–Study度量，我们发现

当选择损失函数为归一化能量期望值时，更新规则 (3.3) 包含虚时间演化 [Yam19、SIKC20、SGS+25]。从这个意义上说，通过恰当地选择度量和代价函数，QRHD 也可以视为一种（纯态）基态搜索算法。

4 收敛时间

如前几节所述，Q(R)HD 通过在计算机上模拟量子耗散动力学来进行参数优化。为了获得最优解或评估复杂度，了解量子动力学的典型时间尺度很有帮助。本节将推导量子力学期望值的时间演化方程$\langle \boldsymbol{x} \rangle$ ，并通过分析该方程估算获得最优解所需的时间尺度。如下文所示，该方程可视为量子版的运动方程。

4.1 QHD

我们从 QHD 的情况开始。在 QHD 中，其所遵循的时间演化方程 $\langle \boldsymbol{x} \rangle$ 与经典运动方程（2.2）类似，为

$$m \langle \ddot{\boldsymbol{x}} \rangle + m \frac{\dot{a}}{a} \langle \dot{\boldsymbol{x}} \rangle + \eta \langle \operatorname{grad} V(\boldsymbol{x}) \rangle = 0 \,, \tag{4.1}$$

如参考文献 [LZW23] 所示。该方程由哈密顿算符（算符方程（2.7））和正则对易关系，通过海森堡方程推导而得；不过，为了分析 QRHD 的收敛时间，下文还将以路径积分形式推导该方程。

接下来，我们来介绍 QHD 的路径积分形式。关于路径积分，参见例如文献 [FHS10、PS95、Mac99]。第 2 节中引入的 QHD 配分函数为

$$Z = \int \mathcal{D}\boldsymbol{x} \mathcal{D}\boldsymbol{p} \exp \mathrm{i} \int \mathrm{d}t \big(\boldsymbol{p} \cdot \dot{\boldsymbol{x}} - H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) \big) \,, \tag{4.2}$$

其中 H 为公式（2.4）。这是相空间上的路径积分，路径积分测度 $\mathcal{D}\boldsymbol{x}\mathcal{D}\boldsymbol{p}$ 源自重写跃迁振幅时插入完备关系。执行动量积分 $\mathcal{D}\boldsymbol{p}$后，得到构型空间中的路径积分

$$Z = \int \mathcal{D}\boldsymbol{x} \exp(\mathrm{i}S[\boldsymbol{x}]) \,, \qquad S[\boldsymbol{x}] = \int \mathrm{d}t L(\boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{x}}, t) = \int \mathrm{d}t a(t) \left(\frac{m}{2} \dot{\boldsymbol{x}}^2 - \eta(t) V(\boldsymbol{x}) \right) , \tag{4.3}$$

其中，路径积分测度定义为

$$\mathcal{D}\boldsymbol{x} \coloneqq \lim_{K \to \infty} \frac{\mathrm{d}^N \boldsymbol{x}(t_k)}{(2\pi \mathrm{i} m a(t_k) \Delta t)^{N/2}} \,, \tag{4.4}$$

其中， K 为时间片的数量；在上式中， t_k 表示第 k 步的时间。我们取各时间片的时间步长相同， $\Delta t = t_{k+1} - t_k$。

在 路径积分形式中，可观测量 $\mathcal{O}(\hat{\boldsymbol{x}})$ 的期望值表示为 s

$$\langle \mathcal{O}(\boldsymbol{x}) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\boldsymbol{x} \mathcal{O}(\boldsymbol{x}) \exp(\mathrm{i}S[\boldsymbol{x}]) \,. \tag{4.5}$$

$\langle \mathcal{O}(\boldsymbol{x}) \rangle$的量子运动方程源自路径积分的部分可积性

$$0 = \int \mathcal{D}\boldsymbol{x} \frac{\delta}{\delta x^i(t)} \Big(\mathcal{O}(\boldsymbol{x}) \exp(\mathrm{i}S[\boldsymbol{x}]) \Big) , \tag{4.6}$$

由此得到

$$\left\langle \frac{\delta \mathcal{O}}{\delta x^i} \right\rangle + \mathrm{i} \left\langle \mathcal{O} \frac{\delta S}{\delta x^i} \right\rangle = 0 , \tag{4.7}$$

其中 $\delta/\delta x^i$ 表示关于坐标变量的泛函导数 x^i。方程（4.7）称为薛温格–戴森（SD）方程。令 $\mathcal{O} = 1$，我们得到如下量子运动方程，即期望值的方程:

$$\left\langle \frac{\delta S}{\delta x^i} \right\rangle = 0 , \tag{4.8}$$

其显式形式为

$$\left\langle a \sum_j \delta_{ij} \Big(m\ddot{x}^j + m\frac{\dot{a}}{a}\dot{x}^j + \eta [\operatorname{grad} V(\boldsymbol{x})]^j \Big) \right\rangle = 0 . \tag{4.9}$$

假设 $a(t) \neq 0$，这与方程（4.1）相同。

估算 QHD 中的收敛时间。 推导出 QHD 中参数的时间演化方程后，我们现在估算 QHD 找到最优解所需的时间尺度 t_*。 t_* 取决于 $a(t)$ 和 $\eta(t)$ 的选择，以及 $V(\boldsymbol{x})$ 的性质。接下来，我们具体考虑 $a(t) = e^{2\gamma t}$ 和 $\eta(t) = \eta = \text{const.} \geq 0$ 的情形。在这种情况下，参数 $\langle \boldsymbol{x} \rangle$ 的时间演化方程变为

$$\langle \ddot{x}^i \rangle + 2\gamma \langle \dot{x}^i \rangle + \frac{\eta}{m} \sum_k \delta^{ik} \partial_k V(\langle \boldsymbol{x} \rangle) = 0 . \tag{4.10}$$

那么 $V(\boldsymbol{x})$ 决定了收敛性质。假设 $V(\boldsymbol{x})$ 可微，且$\boldsymbol{x}_*$是一个局部最小值 $\operatorname{grad} V(\boldsymbol{x}_*) = 0$，并且该点处的海森矩阵是半正定的。在 $V(\boldsymbol{x}$附近展开 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_*$ [CSW25], ，得到

$$V(\boldsymbol{x}) = V(\boldsymbol{x}_*) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_*)^{\mathrm{t}} \operatorname{Hess} V_*(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_*) + \mathcal{O}\big(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_*|^3\big) , \tag{4.11}$$

其中，势 $V(\boldsymbol{x})$ 的海森矩阵定义为

$$(\operatorname{Hess} V)_{ij} \coloneqq \frac{\partial^2 V(\boldsymbol{x})}{\partial x^i \partial x^j} , \tag{4.12}$$

而 $\operatorname{Hess} V_*$ 表示在局部最小值 $\boldsymbol{x}_*$ 处计算的海森矩阵。若在拉格朗日量或哈密顿量（算符）中仅保留二次项，则运动方程简化为

$$\langle \ddot{x}^i \rangle + 2\gamma \langle \dot{x}^i \rangle + \frac{\eta}{m} \sum_{j,k} \delta^{ij} (\operatorname{Hess} V_*)_{jk} (\langle x^k \rangle - x_*^k) = 0 . \tag{4.13}$$

描述了动力学。当 $V(\boldsymbol{x})$ 具有凸二次型时，方程 (4.10) 就恰好变为该方程。方程 (4.13) 是 N维平坦空间中阻尼振子的运动方程，

这意味着参数 $\boldsymbol{x}$ 会向 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_*$ 演化，而收敛行为由 γ表征。当 γ小于（大于） $\sqrt{\frac{\eta}{m}\lambda_{\min}}$ (Hess V_*) 时，系统在收敛过程中表现为欠阻尼（过阻尼）。当 $\gamma=\sqrt{\frac{\eta}{m}\lambda_{\min}}$(Hess V_*) 时，系统处于临界阻尼状态。这里，我们引入记号 $\underline{\lambda}_{\min}(A)$，表示矩阵 A的最小特征值。在这种情况下，通常将收敛评估为

$$t_* \gtrsim \frac{1}{\sqrt{\frac{\eta}{m}\lambda_{\min}(\operatorname{Hess} V_*)}}\left[-W_{-1}\left(\frac{\epsilon_*}{\mathrm{e}}\right)-1\right], \tag{4.14}$$

并且当.....时等号成立

$$\gamma \sim \sqrt{\frac{\eta}{m}\lambda_{\min}(\operatorname{Hess} V_*)}\,. \tag{4.15}$$

这里，t_*被引入为条件 $|\langle\boldsymbol{x}(t_*)\rangle-\boldsymbol{x}_*|\le\epsilon_*|\langle\boldsymbol{x}(0)\rangle-\boldsymbol{x}_*|$首次满足时对应的时间，其中给定一个较小的值 ϵ_*。 $W_{-1}(x)$是满足条件的 Lambert W函数， $W(z)\mathrm{e}^{W(z)}=z$取自满足 $W_{-1}<-1$定义在 $-\mathrm{e}^{-1}<z<0$的分支。该结果与参考文献 [CSW25]中的估计一致。

4.2 QRHD

接下来讨论 QRHD。遵循前面对 QHD 的讨论，我们从配分函数的推导入手，以便在 QRHD 的路径积分形式中计算可观测量的期望值。弯曲空间中相空间上的点粒子的配分函数写作 [Sat77，DT88，BCV17]:

$$Z=\int\mathcal{D}\boldsymbol{x}\mathcal{D}\boldsymbol{p}\exp\mathrm{i}\int\mathrm{d}t\Big(\sum_i p_i\dot{x}^i-\tilde{H}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})\Big), \tag{4.16}$$

˜其中哈密顿量 H 为

$$\tilde{H}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})=a(t)\left(\sum_{i,j}\frac{1}{2m}a^{-2}(t)g^{ij}(\boldsymbol{x})p_ip_j+\eta(t)V(\boldsymbol{x})+a^{-2}(t)\Delta V(\boldsymbol{x})\right), \tag{4.17}$$

且 ΔV 是由公式（3.18）中引入的 Weyl排序所产生的修正项（见公式（3.17））。需要注意的是，乘在 a（t）上的 ΔV（$\boldsymbol{x}$）的幂次与哈密顿量中动能项的幂次相同。执行动量积分 $\mathcal{D}\boldsymbol{p}$ 可得到构型空间路径积分表示

$$Z=\int_{\mathcal{M}_N}[\mathcal{D}\boldsymbol{x}]\exp(\mathrm{i}\mathcal{S}[\boldsymbol{x}])\,, \tag{4.18}$$

其中作用量为

$$\mathcal{S}[\boldsymbol{x}]=\int\mathrm{d}t a(t)\left(\frac{m}{2}\sum_{i,j}g_{ij}(\boldsymbol{x})\dot{x}^i\dot{x}^j-\eta(t)V(\boldsymbol{x})-a^{-2}(t)\Delta\mathcal{V}(\boldsymbol{x})\right), \tag{4.19}$$

而势的额外修正由 [DT88]

$$\Delta\mathcal{V}(\boldsymbol{x})=\Delta V(\boldsymbol{x})+\Delta V'(\boldsymbol{x})\,,\qquad \Delta V'(\boldsymbol{x})=\frac{1}{8m}\sum_{i,j}g^{ij}(\boldsymbol{x})\partial_i\Gamma_j(\boldsymbol{x})\,. \tag{4.20}$$

路径积分测度是如下定义的协变积分测度

$$[\mathcal{D}\boldsymbol{x}] = \lim_{K\to\infty} \prod_{k=1}^{K} \sqrt{g(\boldsymbol{x}(t_k))} \frac{\mathrm{d}^N \boldsymbol{x}(t_k)}{(2\pi \mathrm{i} m a(t_k)\Delta t)^{N/2}} = \mathcal{D}\boldsymbol{x}\sqrt{\operatorname{Det} g}\,, \tag{4.21}$$

whe其中，$\operatorname{Det} g$ 表示与度量张量 $g_{ij}(\boldsymbol{x}$相关的泛函行列式).

在 QRHD 中，可观测量 $\mathcal{O}(\hat{\boldsymbol{x}})$ 的期望值可写为

$$\langle \mathcal{O}(\boldsymbol{x}) \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\mathcal{M}_N} [\mathcal{D}\boldsymbol{x}] \mathcal{O}(\boldsymbol{x}) \exp(\mathrm{i}\mathcal{S}[\boldsymbol{x}])\,, \tag{4.22}$$

而 $\mathcal{O}(\boldsymbol{x})$ 的量子运动方程同样可由部分可积性推出。然而，在 QRHD 中，由于路径积分测度包含度量的泛函行列式，部分可积性恒等式被修改为

$$0 = \int_{\mathcal{M}_N} \mathcal{D}\boldsymbol{x} \frac{\delta}{\delta x^i} \left(\sqrt{\operatorname{Det} g} \mathcal{O}(\boldsymbol{x}) \exp(\mathrm{i}\mathcal{S}[\boldsymbol{x}]) \right), \tag{4.23}$$

而 SD 方程的形式如下:

$$0 = \left\langle \frac{\delta \mathcal{O}}{\delta x^i} \right\rangle + \mathrm{i} \left\langle \mathcal{O} \frac{\delta \mathcal{S}}{\delta x^i} \right\rangle + \langle \mathcal{O}\Gamma_i \rangle\,. \tag{4.24}$$

$\Gamma_i(\boldsymbol{x})$ 的贡献来自 $\sqrt{\operatorname{Det} g}$ 的泛函导数。由于它可改写为

$$\Gamma_i(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} \sum_{j,k} g^{jk}(\boldsymbol{x}) \partial_i g_{jk}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{g(\boldsymbol{x})}} \partial_i \sqrt{g(\boldsymbol{x})} = \frac{1}{2} \partial_i \log g(\boldsymbol{x})\,, \tag{4.25}$$

由此可见，路径积分测度中的 $\sqrt{\operatorname{Det} g}$ 可视为具有如下形式的有效势： $-\frac{\mathrm{i}}{2} \log \operatorname{Det} g$。

QRHD 中参数的时间演化方程可通过在 SD 方程（ $\mathcal{O}(\boldsymbol{x}) = 1$中令4.24）得到。其显式形式为

$$\left\langle a \sum_j g_{ij} \left[m\left(\ddot{x}^j + \sum_{i,k} \Gamma^i_{ik} \dot{x}^i \dot{x}^k \right) + m \frac{\dot{a}}{a} \dot{x}^j + \eta \left(\operatorname{grad}_g V_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{x}) \right)^j \right] \right\rangle = 0\,, \tag{4.26}$$

其中，我们引入有效势 V_{eff}，其定义为

$$V_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{x}) = V(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{\eta a^2} \left(\Delta V(\boldsymbol{x}) + \Delta V'(\boldsymbol{x}) \right) - \frac{\mathrm{i}}{\eta a} \log \sqrt{g(\boldsymbol{x})}\,. \tag{4.27}$$

需要注意的是，势项会受到参数空间几何带来的量子修正，而自然梯度中的势将替换为 $V_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{x})$。

$a(t)$ 和半经典近似。在讨论 QRHD 中的收敛时间之前，我们先对动能项的时变系数 $a(t)$ 与半经典近似之间的关系作一些说明。 $a(t)$ 被视为 Q(R)HD 作用量中的一个整体因子，其表达式为[6]

$$S[\boldsymbol{x}] = \int \mathrm{d}t a(t) \left(\sum_{i,j} g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j - \eta(t) \mathcal{V}(\boldsymbol{x}) \right). \tag{4.28}$$

[6]这里我们以示意形式写出作用量。假设 $\mathcal{V}(\boldsymbol{x})$ 包含来自几何的量子修正，如方程（4.20）中的修正，以及在需要时的 $-\frac{\mathrm{i}}{2} \log g$。

于是，配分函数变为 $\hbar$

$$Z = \int \mathcal{D}\boldsymbol{x} \exp \frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[\boldsymbol{x}] = \int \mathcal{D}\boldsymbol{x} \exp \mathrm{i} \int \mathrm{d}t \frac{a(t)}{\hbar} \left(\sum_{i,j} g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j - \eta(t) \mathcal{V}(\boldsymbol{x}) \right), \tag{4.29}$$

这表明 $1/\hbar$ 和 $a(t)$具有相同的标度，而 $a(t) \to \infty$ 对应于通过对该系数 $a(t)$进行时间调度，使 $\hbar \to 0$ 达到半经典极限。这种对应关系也可以通过将 Q(R)HD 中的哈密顿算符写作以下形式看出：

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{a(t)} \left(-\frac{\Delta_g}{2m} \right) + a(t)\eta(t) V(\hat{\boldsymbol{x}}) = a(t) \left[\frac{1}{a(t)^2} \left(\frac{-\Delta_g}{2m} \right) + \eta(t) V(\hat{\boldsymbol{x}}) \right], \tag{4.30}$$

ˆ 这被视为 $H/\hbar$ 如果我们恢复 $\hbar$。根据这种对应关系，我们可以理解 $a(t)$ 对方程 (4.27) 的依赖关系。众所周知，$\log\sqrt{g(\boldsymbol{x})}$ **的量子修正** $(\Delta V')$ 分别是 $\hbar$ 和 $\hbar^2$ 修正，其标度与方程 (4.27) 中的 $1/a$ 具有相同的标度。

这说明 $a(t)$ 与 $1/\hbar$ 之间的关系，为我们直观理解 QHD 和 QRHD 中的量子效应提供了一些启示。在 SD 方程中，自然梯度中的势被替换为$V_{\text{eff}}(\boldsymbol{x})$，这些修正源于路径积分测度中的量子效应以及动能项的算符排序。就 $a(t$的幂次而言，这些修正受到抑制，如式 (4.27) 所示；这些幂次与标准路径积分计算中 $1/\hbar$的幂次相同。因此我们发现，由于 a的行为，QHD 和 QRHD 中的量子效应在晚期受到抑制。从这个意义上说，Q(R)HD 算法经过设计，使得量子效应在早期显著，而在晚期，经典势 $V(\boldsymbol{x})$ 的贡献占据主导地位。

QRHD 中收敛时间的估算。 我们根据参数的时间演化方程估算 t_* QRHD 求得最优解所需的时间（4.26）。与第 4.1节一样，我们考虑 $a(t) = \mathrm{e}^{2\gamma t}$ 和 $\eta(t) = \eta = \text{const.} \geq 0$ 的情形。在这种情况下，时间演化方程变为

$$\left\langle \ddot{x}^i + \sum_{j,k} \Gamma^i_{jk}(\boldsymbol{x}) \dot{x}^j \dot{x}^k + 2\gamma \dot{x}^i + \frac{\eta}{m} \sum_j g^{ij}(\boldsymbol{x}) \partial_j V_{\text{eff}}(\boldsymbol{x}) \right\rangle = 0\,. \tag{4.31}$$

有效势 $V_{\text{eff}}(\boldsymbol{x})$ 包含对经典势 $V(\boldsymbol{x})$ 的量子修正，如方程（4.27）所示。然而，如上所述，这些量子修正与被抑制因子 $1/a(t) = \mathrm{e}^{-2\gamma t}$ 的高次幂成正比，预计在最优点附近修正较小，这意味着晚期的收敛行为主要由经典势 $V(\boldsymbol{x})$ 控制。因此，在以下分析中，我们忽略这些量子修正，并将 $V_{\text{eff}}(\boldsymbol{x}) \approx V(\boldsymbol{x})$ 近似处理。量子修正对 QRHD 动力学的影响通过附录 C 中的数值计算进行检验。

与 QHD 的情况类似，我们在局部最优点 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_*$ 附近展开势 $V(\boldsymbol{x})$，该点满足 $\partial_i V(\boldsymbol{x}_*) = 0$，且海森矩阵为正定矩阵。于是，经典势的展开式为

$$V(\boldsymbol{x}) = V(\boldsymbol{x}_*) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_*)^{\mathrm{t}} \operatorname{Hess}_g V_* (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_*) + \mathcal{O}(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_*|_g^3)\,, \tag{4.32}$$

其中，$|\bullet|_g$ 表示由度量 g_{ij} 诱导的黎曼流形上的范数，例如 $|\boldsymbol{x}|_g^2 = \sum_{i,\ j} g_{ij}(\boldsymbol{x}) x^i x^j$。$\mathrm{Hess}_g V$ 是黎曼流形上的海森矩阵，其分量为

$$(\mathrm{Hess}_g V)_{ij} := \frac{\partial^2 V(\boldsymbol{x})}{\partial x^i \partial x^j} - \sum_k \Gamma_{ij}^k \frac{\partial V(\boldsymbol{x})}{\partial x^k}\,, \tag{4.33}$$

它是二阶导数的协变形式。$\mathrm{Hess}_g V_*$ 是在 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_*$处计算的海森矩阵。考虑拉格朗日量或哈密顿量（算符）中的二次项，可将运动方程简化为

$$\langle \ddot{x}^i \rangle + \sum_{j,k} \langle \Gamma_{jk}^i(\boldsymbol{x}) \dot{x}^j \dot{x}^k \rangle + 2\gamma \langle \dot{x}^i \rangle + \frac{\eta}{m} \sum_{j,k} \langle g^{ij}(\boldsymbol{x}) (\mathrm{Hess}_g V_*)_{jk} (x^k - x_*^k) \rangle = 0\,. \tag{4.34}$$

该运动方程仍然是非线性的，因为加速项中包含 $\Gamma_{jk}^i(\boldsymbol{x})$，而自然梯度中包含 $g^{ij}(\boldsymbol{x})$。为简化该方程，我们作出一个符合物理直觉的假设，即 $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_*$ 可近似为局部平坦坐标系。通过为 $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_*$引入一个正规坐标，可以系统地处理这一问题，[7] 从而得到

$$\Gamma_{jk}^i(\boldsymbol{x}_*) = 0\,, \tag{4.35}$$

而 $\Gamma_{jk}^i(\boldsymbol{x})$和 $g^{ij}(\boldsymbol{x})$的展开式为

$$\Gamma_{jk}^i(\boldsymbol{x}) = \mathcal{O}(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_*|_g)\,, \qquad g^{ij}(\boldsymbol{x}) = g^{ij}(\boldsymbol{x}_*) + \mathcal{O}(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_*|_g^2)\,. \tag{4.36}$$

在这些假设下，并仅考虑首项，我们得到

$$\langle \ddot{x}^i \rangle + 2\gamma \langle \dot{x}^i \rangle + \frac{\eta}{m} \sum_{j,k} g^{ij}(\boldsymbol{x}_*) (\mathrm{Hess}_g V_*)_{jk} (\langle x \rangle^k - x_*^k) = 0\,, \tag{4.37}$$

这也可视为 QHD 中类似于式（4.13）的阻尼振子的运动方程。因此，沿用推导 QHD 中（4.14）时的相同分析，我们得到收敛时间的下界 t_* 为

$$t_* \gtrsim \frac{1}{\sqrt{\frac{\eta}{m} \lambda_{\min}(g^{-1}\,\mathrm{Hess}_g V_*)}} \left[-W_{-1}\left(\frac{\epsilon_*}{\mathrm{e}}\right) - 1 \right]\,, \tag{4.38}$$

且当.....时等号成立

$$\gamma \sim \sqrt{\frac{\eta}{m} \lambda_{\min}(g^{-1}\,\mathrm{Hess}_g V_*)}\,. \tag{4.39}$$

收敛时间 t_* 定义为：对于给定的小值 ϵ_*，首次满足条件 $|\langle \boldsymbol{x}(t_*) \rangle - \boldsymbol{x}_*|_{g_*} \leq \epsilon_* |\langle \boldsymbol{x}(0) \rangle - \boldsymbol{x}_*|_{g_*}$ 时所需的时间，与 QHD 情形相同。$g^{-1}\mathrm{Hess}_g V$ 的分量为

$$(g^{-1}\,\mathrm{Hess}_g V)^i{}_j = \sum_k g^{ik} (\mathrm{Hess}_g V)_{kj}\,, \tag{4.40}$$

并且已知，$g^{-1}\mathrm{Hess}_g V_*$ 的特征值在驻点处不依赖于坐标系的具体选择 $\partial_i V = 0$。因此，在忽略参数间量子关联以及对势的量子修正 $V(\boldsymbol{x})$的近似下，我们估计 QRHD 收敛到最优点的局部收敛时间 t_* 的下界（4.38）。

[7] 正规坐标在理论物理中的应用已有讨论 [DeW64, DeW67, Gil75, AGFM81, Muk86]。

关于量子修正和量子关联的讨论。量子运动方程中会出现一些量子修正，但根据 $a(t$的行为，我们预计这些影响很小。为了检验这一假设，我们针对若干示例数值求解微分方程（C.1），并确认对 t_* 的下界估计满足附录4.38中的方程（C）。这与我们的观察一致：对势的量子修正带有抑制因子 $1/a$，因此，尽管它们可能影响早期动力学，但其对最终收敛时间的影响可以视为很小。

在结束本小节之前，我们先讨论参数间量子关联的影响。在 QRHD 中，参数演化涉及非平凡的量子关联，这些关联取决于参数空间的几何以及坐标的选取，并通过方程中的非线性项体现出来。要分析这种影响，需要求解薛¨定谔方程及其哈密顿算符（3.14），这需要进行超出上述近似范围的分析。为了了解 QRHD 是否能很好地用作量子优化算¨法，我们针对简单示例对 QRHD 薛定谔方程进行数值求解，并在下一小节中考察解的行为。

4.3 量子动力学的数值模拟

在本小节中，我们针对两个示例数值求解 QRHD 中波函数的时间演化，[8] 并确认 QRHD 能够作为优化算法发挥作用。对于这些示例，我们考虑参数空间几何为平坦或弯曲的情形。

4.3.1 平坦情形

第一种情况是平坦参数空间。我们令 $V(\boldsymbol{x})$ 为二次凸函数，并选择 $g_{ij}(\boldsymbol{x})$ 为 $V(\boldsymbol{x})$ 的海森矩阵，该矩阵是全局常数矩阵。我们发现，$\langle \boldsymbol{x} \rangle$ 遵循一个与经典运动方程相似的方程，但势经过了剪切变换。

对于 $N = 2$，我们考虑以下势

$$V(\boldsymbol{x}) = \frac{m}{2} \boldsymbol{x}^{\mathrm{t}} A_1 \boldsymbol{x} \,, \qquad A_1 = \begin{pmatrix} 1 & -0.9 \\ -0.9 & 1 \end{pmatrix} \,, \tag{4.41}$$

并令 $m = 0.1$，$a(t) = \mathrm{e}^{t/2}$，以及 $\eta = 0.1$。波函数时间演化的数值结果如图 2 所示。上方各图展示的是 $g_{ij}(\boldsymbol{x}) = \delta_{ij}$ 的 QHD 情况，下方各图则展示的是 $g_{ij}(\boldsymbol{x}) = (A_1)_{ij}$ 的 QRHD 情况。这些结果表明，两种情况下的波函数都会收敛，且 QRHD 的收敛速度快于 QHD。这是因为在 QRHD 中，势经过剪切变换，有效海森矩阵的条件数变小了。我们将在第 5.1 节进一步讨论这一点。

4.3.2 弯曲情形

第二种情况是参数空间并非平坦，而是具有非平凡的几何结构。除了在 N 维平坦空间中优化二次凸函数之外，我们

[8] 采用 Crank–Nicolson方法 [Kab24] 来求解含时薛定谔¨方程，其哈密顿算符为（3.14）。

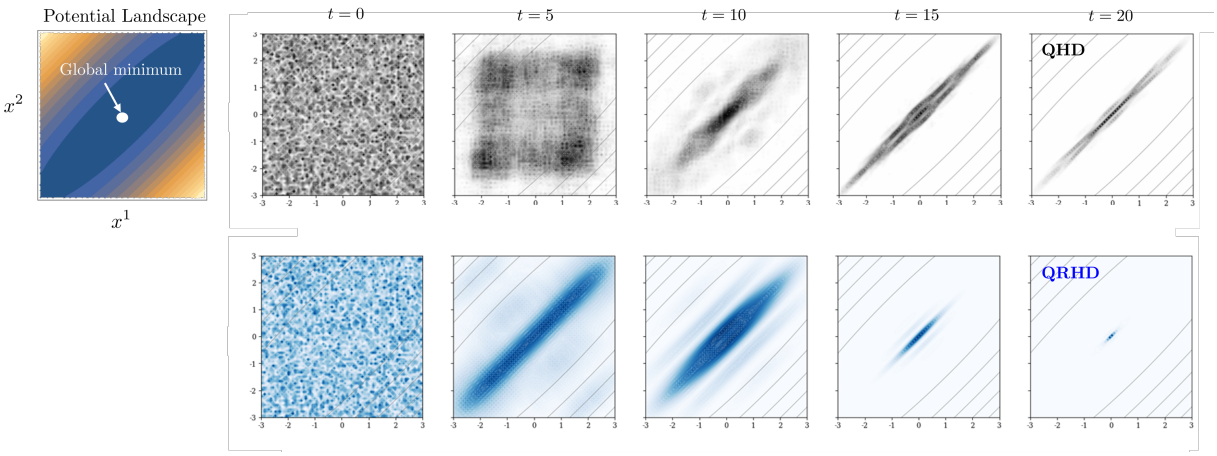


图 2：二维二次凸优化的收敛行为对比。上方各图展示 QHD 情形，下方各图展示 QRHD 情形。在两幅图中，时间均从左向右演进，每个面板都显示波函数模平方的热图。两种情形的初态均取为随机分布。

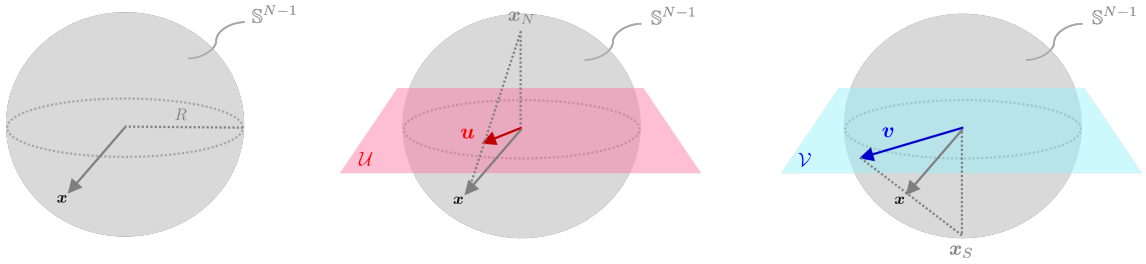


图 3：球面上共形平坦坐标系的示意图。（左）受 $\boldsymbol{x}^2 = R^2$约束在球面 $\mathbb{S}^{N-1}$ 上的直线上的 N 维向量 $\boldsymbol{x}$ 。（中） $\boldsymbol{x}$ 与从北极 $\boldsymbol{x}_N$进行的立体投影 $\boldsymbol{u}$ 之间的对应关系。$\boldsymbol{u}$ 表示 $(N-1)$ 维坐标。（右） $\boldsymbol{x}$ 与从北极 $\boldsymbol{x}_N$ 进行的立体投影 $\boldsymbol{v}$ 之间的对应关系。 $\boldsymbol{v}$ 表示 $(N-1)$ 维坐标。

还对参数施加约束 $\boldsymbol{x}^2 = R^2$ ，其中 R 是一个正实数。该约束使参数空间成为半径为 R 的（$N-1$）维球面，这就是所谓的瑞利商最小化问题。QRHD 通过将 g_{ij}（$\boldsymbol{x}$）设为球面上的度量，提供了一种动态求解此类问题的量子方法。需要注意的是，g_{ij}（$\boldsymbol{x}$）取决于坐标的选择，而选择适当的坐标系 会影响当前算法的性能。

球面的标准选择是球坐标，但球坐标中存在度量分量为零的点，这可能导致拉普拉斯–贝尔特拉米算子等算子发散。为避免发散问题，我们考虑不含坐标奇点的坐标系。本文采用两个维数比环境空间低一维的共形平坦坐标系。图3展示了示意图，其中球面上的任意一点都由从北极和南极出发的立体投影

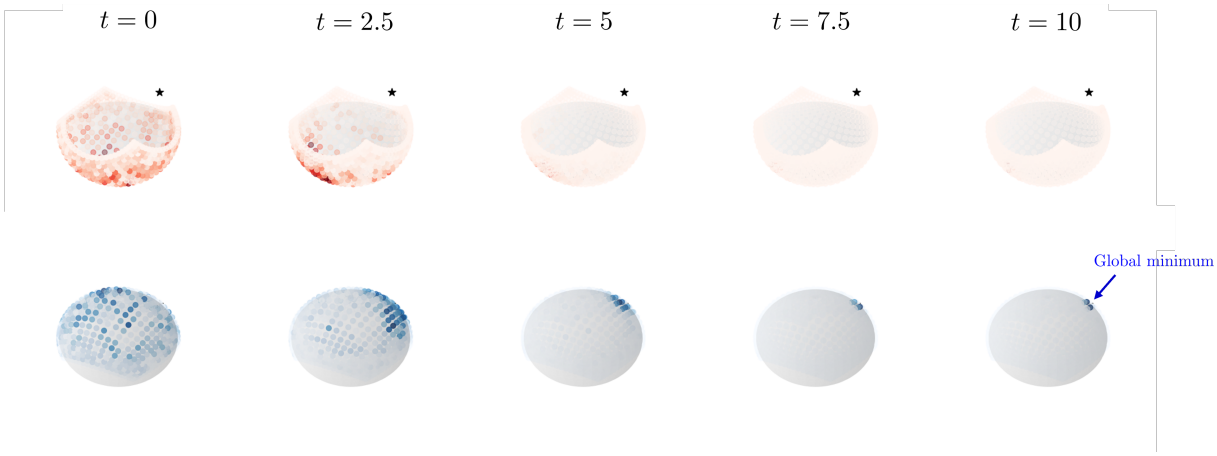


图 4：二维球面上二次凸优化的数值演示。（上）坐标系 $\boldsymbol{u}$中的时间演化。（下）坐标系 $\boldsymbol{v}$中的时间演化。时间从左向右推进，每个面板展示波函数模平方的热图。该问题的最优点以星号标出。两种情况下的初态均取为随机分布。在较晚时刻，我们可以看到， $\boldsymbol{v}$ 的 QRHD 中的波函数收敛到最优点。

投影 $\boldsymbol{u}$ 或 $\boldsymbol{v}$ 分别确定。如果我们将北极和南极取在第 N 个方向上，则坐标之间的关系为

$$u^i = \frac{x^i}{1 - x^N/R}\,, \qquad v^i = \frac{x^i}{1 + x^N/R}\,, \tag{4.42}$$

对于 $i = 1$、……、$N-1$ 及其度量张量具有以下共形平坦形式 a s

$$g_{ij}(\boldsymbol{u}) = \left(\frac{2}{1 + \boldsymbol{u}^2/R^2}\right)^2 \delta_{ij}\,, \qquad g_{ij}(\boldsymbol{v}) = \left(\frac{2}{1 + \boldsymbol{v}^2/R^2}\right)^2 \delta_{ij}\,, \tag{4.43}$$

其中 $\boldsymbol{u}^2 = \sum_{i=1}^{N-1} (u^i)^2$和 $\boldsymbol{v}^2 = \sum_{i=1}^{N-1} (v^i)^2$。共形平坦坐标（$\mathcal{U}$， $\mathcal{V}$）在 $\boldsymbol{u}$， $\boldsymbol{v}$上的定义域 $\mathbb{R}^{N-1}$ 取决于 $\mathbb{S}^{N-1}$上的图册选择，这种选择具有一定程度的任意性。正如后文将要展示的，该选择会直接影响所得算法的计算复杂度。关于 $\mathbb{S}^{N-1}$ 的共形平坦坐标的一些公式和计算汇总于附录 B.2。要将 QRHD 应用于此问题，我们可以在两个坐标系（$\boldsymbol{u}$， $\boldsymbol{v}$）中并行运行量子时间演化，并通过经典后处理比较输出的代价函数值。

我们考虑 $N = 3$ 情形以及以下势

$$V(\boldsymbol{x}) = \frac{m}{2} \boldsymbol{x}^{\mathrm{t}} A_2 \boldsymbol{x}\,, \qquad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix}\,, \tag{4.44}$$

并且我们设定 $m = 1$， $R = 1$， $a(t) = \mathrm{e}^{t/2}$，以及 $\eta = 1$。已知最优点由 A_2 与最小特征值对应的特征向量给出， $\boldsymbol{x}_* = (1/2,\ 1/2,\ 1/\sqrt{2})^{\mathrm{t}}$ 对应势（4.44）。对于此设置，我们数值求解含时薛定谔方程，结果如图4所示，其中绘出了波函数模的平方。

上方（下方）面板显示了坐标系 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{v})$中的时间演化。在两个坐标系中， $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的定义域均取为 $u^i,\ v^i \in [-1,1]$。这些结果表明，对于 $\boldsymbol{v}$ ，QRHD中的波函数收敛至最优点，并且我们证实，当前算法能够发挥优化算法的作用。

5 通过量子电路实现及其复杂度

我们来考虑通过量子电路实现 QRHD，并基于相互作用绘景下的哈密顿量模拟来评估其电路复杂度 [LW18]。假设可以通过相位预言机访问代价函数或势函数 $V(\boldsymbol{x})$，并通过稀疏访问预言机访问动能，则上述哈密顿量模拟的查询复杂度估计为 $\mathcal{O}(\alpha_H \beta_H t_*^2)$ [CSW25]。 t_*是通过第 4 节所讨论的量子动力学进行优化所需的时间尺度。关于此估计的详情，请参见附录 A。 α_H 和 β_H 是

$$\alpha_H \coloneqq \max_t \left[\frac{1}{a(t)}\frac{\|\Delta_g\|}{2m}\right], \qquad \beta_H \coloneqq \max_t \left[a(t)\eta(t)\|V(\boldsymbol{x})\|\right], \tag{5.1}$$

其中， $\|\bullet\|$ 表示谱范数。 α_H 取决于 QRHD 中的度量张量。 β_H 与代价函数的最大值 $V_{\max} \coloneqq \max_t V(\boldsymbol{x})$ 成正比。需要注意的是， α_H和 t_* 取决于 QRHD 中坐标的选择。下文将通过一些示例考察 QHD 与 QRHD 之间的差异。

5.1 平坦情形

我们首先考虑第 4.3.1 节中讨论的问题，即二次凸优化。代价函数为方程（4.41），我们通过两种方式求解该问题：一种是采用 $g_{ij} = \delta_{ij}$ 的 QHD，另一种是采用 $g_{ij} = (A_1)_{ij}$ 的 QRHD。在这里，我们比较通过这两种方法得到的 α_H 和 t_*。

令 $\alpha_{H,\ \mathrm{Q(R)HD}}$ 表示 α_H 在 Q(R)HD 中的情形，其比值计算如下：

$$\frac{\alpha_{H,\mathrm{QRHD}}}{\alpha_{H,\mathrm{QHD}}} = \frac{\|\Delta_g\|}{\|\Delta\|} = \|A_1^{-1}\| = \frac{1}{\lambda_{\min}(A_1)}, \tag{5.2}$$

其中， $\lambda_{\min}(A_1)$ 表示第 A_1 4.1 节中引入的矩阵的最小特征值。关于收敛时间 t_*，可由量子运动方程估算。在 QHD 情形下，方程变为

$$\langle \ddot{\boldsymbol{x}} + 2\gamma\dot{\boldsymbol{x}} + \eta A_1 \boldsymbol{x}\rangle = 0, \tag{5.3}$$

而 t_* 的典型下界可通过第 4.3.1 节中的相同分析进行估算 s

$$t_{*,\mathrm{QHD}} \gtrsim \frac{1}{\sqrt{\eta\lambda_{\min}(A_1)}}, \tag{5.4}$$

因为在这种受迫振荡情况下， t_* 应大于动力学的最长时间尺度，该时间尺度与 A_1 的最小特征值相关。当$\gamma \approx \sqrt{\eta\lambda_{\min}(A_1)}$时，等式成立。另一方面，如果我们取$g_{ij} = (A_1)_{ij}$，则运动方程变为

$$A_1 \langle \ddot{\boldsymbol{x}} + 2\gamma\dot{\boldsymbol{x}} + \eta\boldsymbol{x}\rangle = 0, \tag{5.5}$$

我们将收敛时间估计为

$$t_{*,\mathrm{QRHD}} \gtrsim \frac{1}{\sqrt{\eta}}\,. \tag{5.6}$$

当 $\gamma \approx \sqrt{\eta}$ 时等式成立。下界不依赖于A_1 的特征值，因为它在运动方程中作为整体因子出现。两种方法的 t_* 之比为

$$\frac{\min t_{*,\mathrm{QRHD}}}{\min t_{*,\mathrm{QHD}}} \approx \sqrt{\lambda_{\min}(A_1)}\,, \tag{5.7}$$

这意味着，通过坐标变换并转向 QRHD，优化所需的时间尺度得以缩短。这与第 4.3.1 节中的数值结果一致。

最后，我们来比较针对这个问题，QHD 和 QRHD 的查询复杂度。根据上述计算以及 $\beta_{H,\ \mathrm{QRHD}}/\beta_{H,\ \mathrm{QHD}} \approx \mathcal{O}(1)$，我们发现查询复杂度之比仍为常数量级，

$$\frac{n_{\mathrm{query,QRHD}}}{n_{\mathrm{query,QHD}}} \approx \mathcal{O}(1)\,, \tag{5.8}$$

其中我们使用了 $n_{\mathrm{query}} = \mathcal{O}(\alpha_H \beta_H t_*^2)$。推导过程见附录 A 。这表明，对于这个问题，QHD 和 QRHD 在查询复杂度方面没有显著差异。这是因为量子算法以哈密顿量模拟为基础，这意味着复杂度取决于哈密顿量范数与 t_*的乘积。正如第 4.3.1 节所示，QRHD 显著缩短了收敛时间，但动能项的范数 α_H 因度量张量而增大，这些贡献彼此抵消。这似乎让我们想起了猜想 [BRS+16]：量子系统的“复杂度”由该系统的作用量积分决定。

5.2 弯曲情形

第二个例子是第4.3.2节讨论的问题。代价函数为方程（4.44），约束为 $\boldsymbol{x}^2 = R^2$。我们使用共形平坦坐标系（$\boldsymbol{u}$，$\boldsymbol{v}$）求解这个问题，其度量由方程（4.43）给出。由此，我们将拉普拉斯–贝尔特拉米算子明确写为

$$\Delta_g = \left(\frac{\boldsymbol{u}^2 + R^2}{2R^2}\right)^2 \left[\Delta - 2(N-3)\sum_{i=}^{N-1} \frac{u^i}{\boldsymbol{u}^2 + R^2}\frac{\partial}{\partial u^i}\right]. \tag{5.9}$$

对于 $\boldsymbol{v}$，情况也相同。我们引入共形坐标，使得 $\boldsymbol{u}^2$ 和 $\boldsymbol{v}^2$ 至多为 R^2 阶（且因子 $N-3$ 不太大），于是得到 $\|\Delta_g\| \sim \|\Delta\|$，这意味着有限的 α_H也不会太大。然而，如果我们改变 $\mathcal{U}$ 和 $\mathcal{V}$的区域，α_H 可能会因相对较大的 $\boldsymbol{u}^2$ 和 $\boldsymbol{v}^2$而增大。从这个意义上说，QRHD 的实现成本取决于我们所考虑问题的流形图册的选择。

在当前问题中，共形坐标 $V(\boldsymbol{x}(\boldsymbol{u}))$ 和 $V(\boldsymbol{x}(\boldsymbol{v}))$ 中的损失函数是 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$的非线性函数。通常很难估算收敛到全局最小值所需的时间。作为一种简易估算，我们改为根据第 4.2 节中的一些近似，按照式（4.38）评估收敛到局部最小值所需的时间。在当前情形下，值得注意的是

驻点处的特征值 $g^{-1}\mathrm{Hess}_g V$ 为 $m(\lambda(A_2) - \lambda_{\min}(A_2)$，其中 $\lambda(A_2)$ 表示矩阵 A_2 的一个特征值。于是，我们得到

$$t_* \gtrsim \frac{1}{\sqrt{\eta(\lambda_{\mathrm{nmin}}(A_2) - \lambda_{\min}(A_2))}} \left[-W_{-1}\left(\frac{\epsilon_*}{\mathrm{e}}\right) - 1 \right], \tag{5.10}$$

并且，当 $\gamma \approx \sqrt{\eta(\lambda_{\mathrm{nmin}}(A_2) - \lambda_{\min}(A_2))}$ 时，下界可以达到。$\lambda_{\mathrm{nmin}}(A_2)$ 是 A_2 的次小特征值。也就是说，通过选择 $\gamma \approx \sqrt{\eta(\lambda_{\mathrm{nmin}}(A_2) - \lambda_{\min}(A_2)}$，可以发现算法会在一段不依赖于参数维数的时间内收敛。

6 结论

本文提出了 QRHD，它将 QHD 推广到黎曼流形上的连续优化。在 QRHD 中，动能项扩展为非正则形式，从而纳入参数空间的几何信息，即度量张量 $g_{ij}(\boldsymbol{x})$。引入度量使我们能够将关于坐标选择和几何约束的先验知识纳入动力学，例如瑞利商中的范数约束 $\boldsymbol{x}^2 = R^2$ 。

我们提出的 QRHD 哈密顿算符在动能项中包含拉普拉斯–贝尔特拉米算子 Δ_g。我们还引入了描述 Q(R)HD 的路径积分形式，以分析 Q(R)HD 的量子动力学并估算收敛项。研究发现，几何性质带来的量子修正会出现在有效势中，但与经典贡献相比，它们受到 $a(t)$ 的更高次幂抑制。这意味着，后期的收敛行为主要受经典势控制，而尽管 QRHD 的收敛行为本质上可能取决于参数空间的几何性质，量子修正在动力学早期阶段占主导地位。此外，作为数值演示，我们展示如下内容:

(i) 对于平坦空间上的二次优化，选择适当的度量可以改善收敛性。(ii) 通过采用球面度量，我们在同一框架下处理带有范数约束的优化，并确认 QRHD 在曲线参数空间上也能作为优化算法发挥作用。

我们还讨论了一种基于含时哈密顿量模拟的量子电路实现，并评估了 QRHD 的查询复杂度。

这些结果表明，QRHD 不仅为量子优化算法提供了实用的扩展，也在几何与量子动力学之间搭建了一座概念桥梁。尤其是，融入类似于引力或规范理论背景中所出现的几何结构的自由度，或许对于设计高效的优化算法，以及深化我们对结构化参数空间上量子动力学的理论理解，都具有重要作用。从这个意义上说，QRHD 提供了一个将几何与量子动力学驱动的连续优化统一起来的框架，预计将推动理论和应用领域的进一步发展。

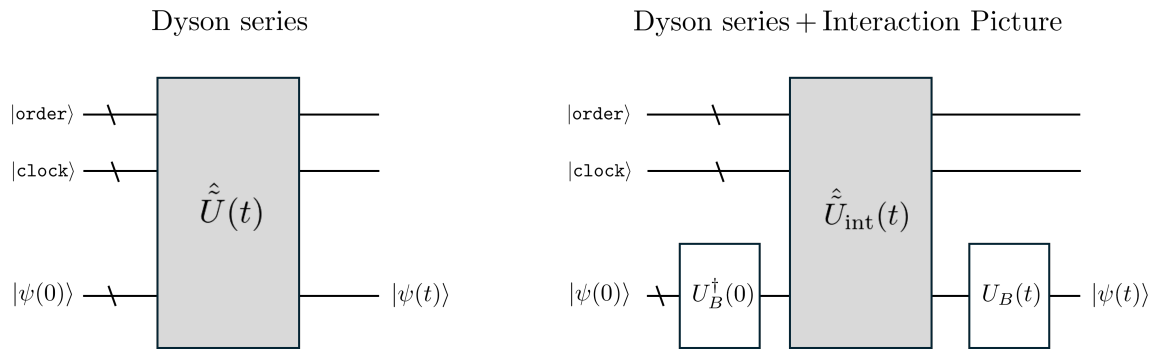


图5：用于含时哈密顿量模拟的示意量子电路图。左侧基于戴森级数展开 [KSB19], ，右侧则进一步采用相互作用绘景 [LW18]。在两个面板中， |时钟⟩ 是用于管理时间排序的寄存器，而 |阶数⟩ 是用于管理戴森级数展开中阶数的寄存器。

致谢

作者感谢 Naoki Yamamoto 提供的宝贵意见并参与讨论。本研究得到文部科学省量子飞跃旗舰计划资助，项目编号：JPMXS0120319794。Y.A. 感谢日本科学技术振兴机构的资助，项目编号：JPMJPF2221。

一种用于含时哈密顿量模拟的量子电路

Q(R)HD 是一种量子算法，其中量子态的时间演化充当优化过程。实现该算法时，主要关注的是描述优化动力学的哈密顿算符所对应的时间演化酉算子

$$\hat{U} = \mathcal{T} \exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t' \hat{H}(t')\right), \tag{A.1}$$

其中， $\mathcal{T}$ 表示时间排序算子。该酉算子的量子电路是实现 Q(R)HD 并利用输出量子态求得位置算子的期望值的基础。

已知，酉算子 (A.1) 可通过基于戴森级数展开的量子算法来实现 [KSB19]。该方法通过扩展系统近似式 (A.1)，得到一个 ˆ ˆ
˜ ˜ ˆ 酉算子 $U(t)$，其中 $U(t)$由 $H(t)$ 的块编码（BE）构造而成。图 5 左侧面板展示了示意电路图，对应于参考文献 [KSB19]中的图 1。由于该量子算法基于 H的块编码，其复杂度由 $H(t)$ 的最大谱范数 $\|H\|_{\max} = \max$
$_t \|H\|_{\max}$表征。然而，在 Q(R)HD 中，为了使动力学收敛，需要在较晚时刻增大势项的范数，这会导致较大的 $\|H\|_{\max}$ 和电路复杂度。

一种可能的解决方法是，基于相互作用绘景进行哈密顿量模拟，从而避免势项的算子范数增大。 [LW18], 在这种方法中，通过引入与有问题的

算符。我们将哈密顿算符拆分为

$$\hat{H}(t) = \hat{A}_H(t) + \hat{B}_H(t)\,, \qquad \hat{A}_H = \frac{1}{a(t)}\left(\frac{-\Delta_{(g)}}{2m}\right), \qquad \hat{B}_H = a(t)\eta(t)V(\hat{\boldsymbol{x}})\,, \tag{A.2}$$

ˆ 并考虑相互作用绘景，其中 B_H 被视为非微扰项。相互作用绘景中的态定义为

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_B(t)\,|\psi(t)\rangle\ , \qquad \hat{U}_B(t) = \mathcal{T}\exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\hat{B}_H(t')\right). \tag{A.3}$$

$|\psi_I(t)\rangle$ 的时间演化由下式给出

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\psi_I(t)\rangle = \hat{H}_{\mathrm{int}}(t)\,|\psi_I(t)\rangle\ , \qquad \hat{H}_{\mathrm{int}} \coloneqq \hat{U}_B^\dagger(t)\hat{A}_H(t)\hat{U}_B(t)\,, \tag{A.4}$$

这是相互作用绘景中 $|\psi_I(t)\rangle$ 的薛定谔方程，其哈密顿量算符为 $H_{\mathrm{int}}(t)$。相互作用绘景中的时间演化算符由下式给出

$$\hat{U}_{\mathrm{int}} = \mathcal{T}\exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t'\hat{H}_{\mathrm{int}}(t')\right)\ , \tag{A.5}$$

ˆ并且我们将扩展系统的酉算符写为 U_{int}。该方法的量子电路如图 5右图所示。由时间演化生成元的范数表征的电路复杂度为 $\|H_{\mathrm{int}}\| = \|A_H\|$，因为 $U_B(t)$ 是酉算符。这意味着电路复杂度不会因 $a(t$而呈现无界增长。以下分析中，我们假设采用基于此相互作用绘景的实现。

接下来分析实现 QHD 的量子电路的复杂度。$U_{\mathrm{int}}(t)$ 的 ˆ复杂度表示为

$$(\text{complexity of a BE of } \hat{H}_{\mathrm{int}}) \times \mathcal{O}\left(\alpha_H T\frac{\log(\alpha_H T/\epsilon)}{\log\log(\alpha_H T\epsilon)}\right)\ , \tag{A.6}$$

其中我们定义 [KSB19]

$$\alpha_H = \max_t \|A_H(t)\|\,. \tag{A.7}$$

T 是模拟时间；我们通常取收敛时间 $T = t_*$，而 ϵ 是时间演化中的目标误差 ˆ。式 (A.6) 中的第二个因子来源于 $U_{\mathrm{int}}(t)$ 是基于截断戴森级数展开 [KSB19]构造的。$\alpha_H T$ 表示时间段的数量，而 $\log(\alpha_H T/\epsilon)/\log\log(\alpha_H T/\epsilon)$ 对应于戴森级数的截断阶数。这个因子只取决于 α_H，这是由于采用了相互作用绘景。另一方面，ˆ H_{int} [9] 的块编码由实现ˆ A_H 的块编码和酉算符 U_B组成，这两者都由辅助量子比特控制。令 n_A 和 n_{U_B} 分别表示构造它们所需的预言机查询次数。那么，构造 $U_{\mathrm{int}}(t)$ 所需的预言机查询次数 ˆ可写为

$$\mathcal{O}\left((n_A + n_{U_B})\alpha_H T\frac{\log(\alpha_H T/\epsilon)}{\log\log(\alpha_H T/\epsilon)}\right)\ . \tag{A.8}$$

[9]ˆ 的块编码 H_{int} 记作 哈密顿量-T，参见文献 [LW18,CSW25]。

在 QHD 中，我们估计粒子位置 $\langle \boldsymbol{x}(T)\rangle = \langle \psi(T)|\hat{\boldsymbol{x}}|\psi(T)\rangle$ 的期望值，并要求估计量与真实均值之间的绝对偏差超过 ϵ 的概率至多为 δ，这意味着通过集中不等式需要 $\mathcal{O}(\log(1/\delta))$ 个样本。这使得哈密顿量模拟的实现次数为 $\mathcal{O}(\log(1/\delta))$。

综合这些估算，实现 QHD 所需的查询次数记为n_{query}，其表达式为

$$n_{\text{query}} = n_{\text{query},A} + n_{\text{qury},U_B}\,, \tag{A.9}$$

$$n_{\text{query},A} = \mathcal{O}\left(n_A \alpha_H T \frac{\log(\alpha_H T/\epsilon)}{\log\log(\alpha_H T/\epsilon)} \log(1/\delta)\right)\,, \tag{A.10}$$

$$n_{\text{qury},U_B} = \mathcal{O}\left(n_{U_B} \alpha_H T \frac{\log(\alpha_H T/\epsilon)}{\log\log(\alpha_H T/\epsilon)} \log(1/\delta)\right)\,. \tag{A.11}$$

对 n_{U_B} 的评估。 我们来估算受辅助量子比特控制的 U_B 所需的查询次数。由于 $\hat{U}_B$ 取决于代价函数 $V(\boldsymbol{x})$，实现受辅助量子比特控制的 U_B 需要一种访问 $V(\boldsymbol{x})$ 结构的机制。[10] 遵循参考文献 [CSW25], ，我们假设代价函数的相位预言机 O_p

$$O_p\,|\boldsymbol{x}\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}F}\,|\boldsymbol{x}\rangle\,, \qquad \hat{F} = \mathrm{i}\sum_{\boldsymbol{x}} \frac{V(\boldsymbol{x})}{2V_{\max}}\,|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|\,. \tag{A.12}$$

我们将 n_{U_B} 定义为对 O_p 的访问次数，并估算为

$$n_{U_B} = \mathcal{O}\left(\left[\int_0^T \mathrm{d}t B_H(t)\right]\log^2(1/\epsilon)\right)\,. \tag{A.13}$$

因子 $\log^2(1/\epsilon)$ 的来源是，$\hat{F}$ 的块编码查询复杂度按 $\log(1/\epsilon)$ 缩放，而辅助量子比特的数量按 $\log(1/\epsilon)$ 缩放。

对于 $a = \mathrm{e}^{2\gamma t}$ $\eta = 1$，方程（A.13）中的积分可计算为

$$\int_0^T \mathrm{d}t B_H(t) = \int_0^T \mathrm{d}t \mathrm{e}^{2\gamma t} V \le \frac{1}{2\gamma}\left(\mathrm{e}^{2\gamma T} - 1\right)V_{\max} \approx \frac{1}{2\gamma}\mathrm{e}^{2\gamma T}V_{\max} = \frac{\beta_H}{2\gamma}\,, \tag{A.14}$$

其中 β_H 是由下式定义的势项的最大算子范数

$$\beta_H = \max_t \|\hat{B}_H(t)\| = \max_t \|a(t)\eta(t)V(\hat{\boldsymbol{x}})\| = \mathrm{e}^{2\gamma T}V_{\max}\,. \tag{A.15}$$

然后，我们发现对于 $a(t) = \mathrm{e}^{2\gamma t}$ 和 $\eta(t) = 1$

$$n_{\text{query},U_B} = \mathcal{O}\left(\frac{\beta_H}{\gamma}\alpha_H T \log^2(1/\epsilon)\frac{\log(\alpha_H T/\epsilon)}{\log\log(\alpha_H T/\epsilon)}\log(1/\delta)\right)\,, \tag{A.16}$$

这对应于参考文献 [CSW25]中的方程（322）。

[10] 在参考文献 [SKY+25]中，作为偏微分方程求解器运行的量子电路充当代价函数的预言机$V(\boldsymbol{x})$。

对 n_A的评估。 我们来估计构造 A_H的辅助比特控制的块编码所需的查询次数。[11] 为了构造这个块编码，我们需要一种机制来访问动能项 A_H的矩阵表示结构。注意到 A_H的矩阵表示，即拉普拉斯算子 Δ的矩阵表示，通常是稀疏矩阵，[12] 我们可以将矩阵表示 A_H 视为稀疏矩阵。因此，我们假设可以通过标准稀疏矩阵访问预言机访问 A_H:

$$\mathcal{O}_r|i\rangle|j\rangle = |i\rangle|r_{ij}\rangle\,, \qquad \mathcal{O}_c|i\rangle|j\rangle = |c_{ij}\rangle|j\rangle\,, \qquad \mathcal{O}_a|i\rangle|j\rangle|0\rangle^{\otimes b} = |i\rangle|j\rangle|a_{ij}\rangle\,, \tag{A.17}$$

其中，r_{ij} (c_{ij}) 表示 A_H 的第 i 行中第 j 个非零元素的索引（或第 j 列中第 i 个非零元素的索引），而 a_{ij} 表示 $\hat{}A_H$ 的 (i, j) 项的 b 位表示。我们将 n_A 定义为构造 $\hat{}A_H$ 的受控块编码所需访问 $\mathcal{O}_{r,\ c,\ a}$ 的次数。[13]

根据参考文献 [GSLW18],中的引理49，我们得到

$$n_A = \mathcal{O}\left(\sqrt{\frac{s(\hat{A}_H)}{\alpha_H}}\log^2(1/\epsilon)\right)\,, \tag{A.18}$$

其中，$s(A_H)$ 表示 A_H 的稀疏度，因子 $\log(1/\epsilon)$ 对应于辅助量子比特的数量。由此可得，查询次数为

$$n_{\text{query},A} = \mathcal{O}\left(T\sqrt{s(\hat{A}_H)\alpha_H}\log^2(1/\epsilon)\frac{\log(\alpha_H T/\epsilon)}{\log\log(\alpha_H T/\epsilon)}\log(1/\delta)\right) \in \tilde{\mathcal{O}}\left(T\sqrt{s(\hat{A}_H)\alpha_H}\log(1/\delta)\right)\,. \tag{A.19}$$

总查询次数。由方程（A.9）、（A.10）、（A.11）、（A.16）和（A.19），我们得到 Q(R)HD 的查询复杂度。

$$n_{\text{query}} = \mathcal{O}\left(\left(\sqrt{s(\hat{A}_H)\alpha_H} + \alpha_H V_{\max}\left[\int_0^T \mathrm{d}t a(t)\eta(t)\right]\right)T\log^2(1/\epsilon)\frac{\log(\alpha_H T/\epsilon)}{\log\log(\alpha_H T/\epsilon)}\log(1/\delta)\right)\,. \tag{A.20}$$

对于 $a(t) = \mathrm{e}^{2\gamma t}$ 和 $\eta = 1$，由 n_{U_B} 贡献的积分计算为 $\mathrm{e}^{2\gamma T}$。参考文献 [CSW25] 中的分析结果方程（322）与我们的结果一致，只要忽略 $n_{\text{query},\ A}$ 的贡献。注意，若 $T = t_* \approx 1/\gamma$，则有 $n_{\text{query},\ U_B} \approx \mathcal{O}(\alpha_H \beta_H t_*^2)$。

B 几何约定

在本附录中，我们总结了本文所用几何量的约定和定义。

[11]关于拉普拉斯算子的块编码的具体示例，另请参阅文献 [KAL+25、SS25]。[12]要明确指定其结构，必须选择空间的离散化 $\boldsymbol{x}$、有限差分格式和边界条件。[13]此类稀疏矩阵访问预言机最早见于文献 [ATS03], ，此后已广泛用于哈密顿量模拟领域 [BACS07、BC12、LC17、CK11]。然而请注意，构造此类黑盒预言机通常是一项极具挑战性的任务 [CLVBY24]。

B.1 约定

我们考虑一个黎曼流形，在坐标 $\boldsymbol{x}$ 下，其线元为

$$\mathrm{d}s^2 = \sum_{i,j} g_{ij}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}x^i\mathrm{d}x^j, \tag{B.1}$$

其中$g_{ij}(\boldsymbol{x})$是一个实对称矩阵。我们通过要求 g^{ij} 为其逆矩阵，使得

$$\sum_k g^{ik}g_{kj} = \delta^i_j, \tag{B.2}$$

成立。向量和张量的指标升降使用此度量张量定义：

$$A_i = \sum_j g_{ij}A^j\,, \qquad A_i = \sum_j g^{ij}A_j\,. \tag{B.3}$$

对于此度量，列维-奇维塔联络定义为

$$\Gamma^i_{jk} = \frac{1}{2}\sum_l g^{il}(\partial_j g_{lk} + \partial_k g_{jl} - \partial_l g_{jk}), \tag{B.4}$$

曲率张量定义为

$$R_{ij}{}^k{}_l = \partial_i\Gamma^k_{jl} - \partial_j\Gamma^k_{il} + \sum_m\big(\Gamma^k_{im}\Gamma^m_{jl} - \Gamma^k_{jm}\Gamma^m_{il}\big), \tag{B.5}$$

$$R_{ij} = \sum_k R_{ki}{}^k{}_j = \sum_k\Big(\partial_k\Gamma^k_{ij} - \partial_i\Gamma^k_{kj} + \sum_m\big(\Gamma^k_{km}\Gamma^m_{ij} - \Gamma^k_{im}\Gamma^m_{kj}\big)\Big)\,, \tag{B.6}$$

$$\mathcal{R} = \sum_{i,j} g^{ij}R_{ij}\,. \tag{B.7}$$

在此约定下，如下所示，球面的里奇标量为正。

B.2 $\mathbb{S}^{N-1}$上的坐标

我们总结本文所用的 N 维球面 $\mathbb{S}^{N-1}$ 上的坐标。半径为 R 的球面 $\mathbb{S}^{N-1}$ 可定义为 $\mathbb{R}^N$ 中的子空间，满足

$$\boldsymbol{x}^2 = \sum_{i=1}^N (x^i)^2 = R^2\,, \tag{B.8}$$

我们通过从北极或南极向赤道平面进行立体投影，引入球面上的坐标。设北极和南极位于 $x^N = \pm R$，则立体投影坐标 $(\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v})$ 与 $\mathbb{R}^N$ 中的坐标 $\boldsymbol{x}$ 之间的关系为

$$u^i = \frac{x^i}{1 - x^N/R}\,, \qquad v^i = \frac{x^i}{1 + x^N/R}\,, \qquad (i = 1, \ldots, N-1) \tag{B.9}$$

逆变换如下：

$$\begin{cases} x^i = \dfrac{2u^i}{1 + \boldsymbol{u}^2/R^2} \\[2ex] x^N = R\dfrac{\boldsymbol{u}^2 - R^2}{\boldsymbol{u}^2 + R^2} \end{cases}, \qquad \begin{cases} x^i = \dfrac{2v^i}{1 + \boldsymbol{v}^2/R^2} \\[2ex] x^N = R\dfrac{R^2 - \boldsymbol{v}^2}{R^2 + \boldsymbol{v}^2} \end{cases}, \tag{B.10}$$

其中 $\boldsymbol{u}^2 = \sum_{i=1}^{N-1} (u^i)^2$ 和 $\boldsymbol{v}^2 = \sum_{i=1}^{N-1} (v^i)^2$。在任一坐标系中，度量的形式都相同：

$$\mathrm{d}s^2 = \frac{4}{(1+\boldsymbol{u}^2/R^2)^2} \sum_{i,j} \delta_{ij} \mathrm{d}u^i \mathrm{d}u^j \,, \qquad \mathrm{d}s^2 = \frac{4}{(1+\boldsymbol{v}^2/R^2)^2} \sum_{i,j} \delta_{ij} \mathrm{d}v^i \mathrm{d}v^j \,. \tag{B.11}$$

也就是说，

$$g_{ij}(\boldsymbol{u}) = \frac{4}{(1+\boldsymbol{u}^2/R^2)^2} \delta_{ij} \,, \qquad g_{ij}(\boldsymbol{v}) = \frac{4}{(1+\boldsymbol{v}^2/R^2)^2} \delta_{ij} \,. \tag{B.12}$$

由此度量，对于坐标系 $\boldsymbol{u}$，我们得到

$$\Gamma^i_{jk}(\boldsymbol{u}) = \frac{1}{2}\Big[\delta^i_k \partial_j \xi(\boldsymbol{u}) + \delta^i_j \partial_k \xi(\boldsymbol{u}) - \delta_{jk} \partial^i \xi(\boldsymbol{u})\Big] \,, \tag{B.13}$$

$$\begin{aligned} R_{ij}{}^k{}_l(\boldsymbol{u}) = {} & \frac{1}{2}\Big[\delta^k_j \partial_i \partial_l \xi(\boldsymbol{u}) - \delta_{jl} \partial_i \partial^k \xi(\boldsymbol{u}) - \delta^k_i \partial_j \partial_l \xi(\boldsymbol{u}) - \delta_{il} \partial_j \partial^k \xi(\boldsymbol{u})\Big] \\ & + \frac{1}{4}\Big[2\delta^k_i \partial_j \xi(\boldsymbol{u}) \partial_l \xi(\boldsymbol{u}) + 2\delta^k_{(j} \partial_{l)} \xi(\boldsymbol{u}) \partial_i \xi(\boldsymbol{u}) - 2\delta_{i(j} \partial_{l)} \xi(\boldsymbol{u}) \partial^k \xi(\boldsymbol{u}) - 2\delta^k_j \partial_i \xi(\boldsymbol{u}) \partial_l \xi(\boldsymbol{u}) \\ & - 2\delta^k_{(i} \partial_{l)} \xi(\boldsymbol{u}) \partial_j \xi(\boldsymbol{u}) + 2\delta_{j(i} \partial_{l)} \xi(\boldsymbol{u}) \partial^k \xi(\boldsymbol{u}) - 2\delta^k_{[i} \delta_{j]l} (\partial \xi(\boldsymbol{u}))^2\Big] \,, \end{aligned} \tag{B.14}$$

$$R_{ij}(\boldsymbol{u}) = \frac{1}{2}\Big[-(D-2)\partial_i \partial_j \xi(\boldsymbol{u}) - \delta_{ij} \partial^2 \xi(\boldsymbol{u})\Big] + \frac{D-2}{4}\Big[\partial_i \xi(\boldsymbol{u}) \partial_j \xi(\boldsymbol{u}) - \delta_{ij} (\partial \xi(\boldsymbol{u}))^2\Big] \,, \tag{B.15}$$

$$\mathcal{R}(\boldsymbol{u}) = -(D-1)\partial^2 \xi(\boldsymbol{u}) - \frac{(D-1)(D-2)}{4} (\partial \xi(\boldsymbol{u}))^2 = \frac{N(N-1)}{R^2} \,. \tag{B.16}$$

在这些公式中，我们将度量中的整体因子（B.12）写作

$$\xi(\boldsymbol{u}) := \log\left(\frac{2}{1+\boldsymbol{u}^2/R^2}\right)^2 , \tag{B.17}$$

而导数为

$$\partial_i \xi(\boldsymbol{u}) = -\frac{4}{1+\boldsymbol{u}^2/R^2} \frac{u_i}{R} \,, \qquad \partial_i \partial_j \xi(\boldsymbol{u}) = -\frac{4}{1+\boldsymbol{u}^2/R^2} \frac{1}{R} \delta_{ij} + \frac{8}{(1+\boldsymbol{u}^2/R^2)^2} \frac{u_i u_j}{R^2} \,, \tag{B.18}$$

$$\partial^2 \xi(\boldsymbol{u}) = \sum_i \partial_i \partial_i \xi(\boldsymbol{u}) = -\frac{4}{1+\boldsymbol{u}^2/R^2} \frac{N}{R} + \frac{8u^2/R^2}{(1+\boldsymbol{u}^2/R^2)^2} \,. \tag{B.19}$$

我们记

$$(\partial \xi(\boldsymbol{u}))^2 = \sum_i (\partial_i \xi(\boldsymbol{u}))^2 \,. \tag{B.20}$$

For 坐标 $\boldsymbol{v}$，将上述方程中的 $\boldsymbol{u}$替换为 $\boldsymbol{v}$即可得到结果 .

C 从（半）经典运动方程估算收敛时间

在本附录中，我们通过几个具体例子分析方程（4.31）所描述的参数演化，并验证趋向最优解的（局部）收敛时间 t_* 满足不等式（4.38）。我们考虑第4.3.2节讨论的问题，即寻找 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_*$ 使 $V(\boldsymbol{x}) = \frac{m}{2} \boldsymbol{x}^{\mathrm{t}} A \boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{x} = (x^1, \ldots, x^N)^{\mathrm{t}}$ 满足 $\boldsymbol{x}^2 = R^2$的问题。在本

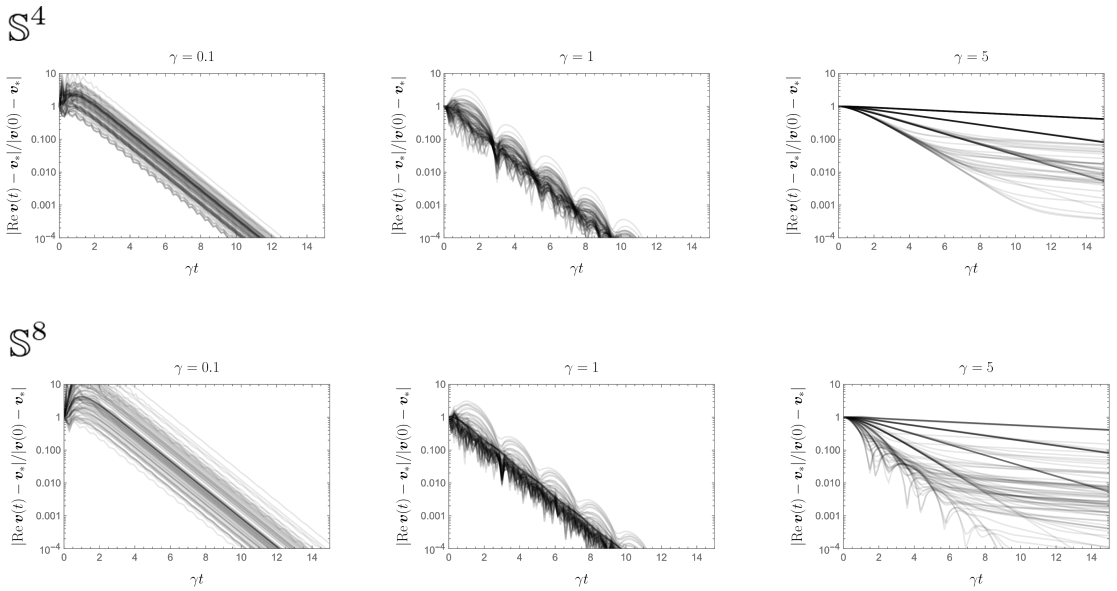


图6：方程（C.1）解的行为。上方面板显示 $N = 5$ 的结果，下方面板显示 $N = 9$ 的结果。

附录中，我们通过适当的相似变换将矩阵 A 对角化为 $\mathrm{diag}(1_2, 2_2, \ldots, N^2)$，并假设最优解 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_*$的第 N 个分量为正。此外，为简单起见，我们令 $m = R = \eta(t) = 1$ 。

我们在共形平直坐标中考虑上述优化问题，如第 4.3.2 节所述。为分析该方程，我们作出以下假设：忽略参数之间的量子关联，并令期望值满足 $\langle v^i v^j \rangle = \langle v^i \rangle \langle v^j \rangle$。在此设置下，$\langle \boldsymbol{v} \rangle$ 的时间演化方程可写为

$$\langle \ddot{v}^i \rangle + \sum_{j,k} \Gamma^i_{kl}(\langle \boldsymbol{v} \rangle) \langle \dot{v}^j \rangle \langle \dot{v}^k \rangle + 2\gamma \langle \dot{v}^i \rangle + \frac{\eta}{m} \sum_j g^{ij}(\langle \boldsymbol{v} \rangle) \partial_j V_{\mathrm{eff}}(\langle \boldsymbol{v} \rangle) = 0\,. \tag{C.1}$$

微分方程（C.1）解的行为取决于矩阵 A 以及初始条件 $\langle \boldsymbol{v}(0) \rangle$ 和 $\langle \dot{\boldsymbol{v}}(0) \rangle$。满足上述条件的 A 有无穷多种选择；在本分析中，对于固定维数 N，我们生成 A 的 100 个随机实例，使其满足这些条件，并对每个实例数值求解微分方程（C.1）。对于初始条件，我们针对每个实例随机选择满足 $\boldsymbol{v}(0)$ $|\langle \boldsymbol{v}(0) \rangle - \boldsymbol{v}_*| = 0.1R$ 的 $\dot{\boldsymbol{v}}(0)$ $\langle \dot{\boldsymbol{v}}(0) \rangle = \boldsymbol{0}$。

图 6 展示了方程 (C.1) 的解的数值结果。在上、下两排图中，横轴为 γt，纵轴表示 $|\mathrm{Re}\,\langle \boldsymbol{v}(t) \rangle - \boldsymbol{v}_*|/|\langle \boldsymbol{v}(0) \rangle - \boldsymbol{v}_*|$。从左到右，$\gamma$依次取值为 $\gamma = 0.1$、1、5。上排图的结果对应 $N = 5$，下排图则对应 $N = 9$。每幅图都显示了 100 条黑色曲线，分别对应矩阵A 和初始条件的不同取值。在所有情况下，随着时间推移，参数 $\langle \boldsymbol{v}(t) \rangle$ 都会收敛到最优点 $\boldsymbol{v}_*$，这意味着 $|\mathrm{Re}\,\langle \boldsymbol{v}(t) \rangle - \boldsymbol{v}_*|/|\langle \boldsymbol{v}(0) \rangle - \boldsymbol{v}_*|$ 趋于 0。

接下来，我们估计收敛时间与 t_* 之间的关系 γ。作为收敛判据，我们将 t_* 定义为满足 $|\mathrm{Re}\,\langle \boldsymbol{v}(t) \rangle - \boldsymbol{v}_*|/|\langle \boldsymbol{v}(0) \rangle - \boldsymbol{v}_*| \leq \epsilon_* = 0.01$的时间。图7展示了 t_* 与 γ 之间关系的数值结果，其中 $N = 5$, 9。每幅图都显示

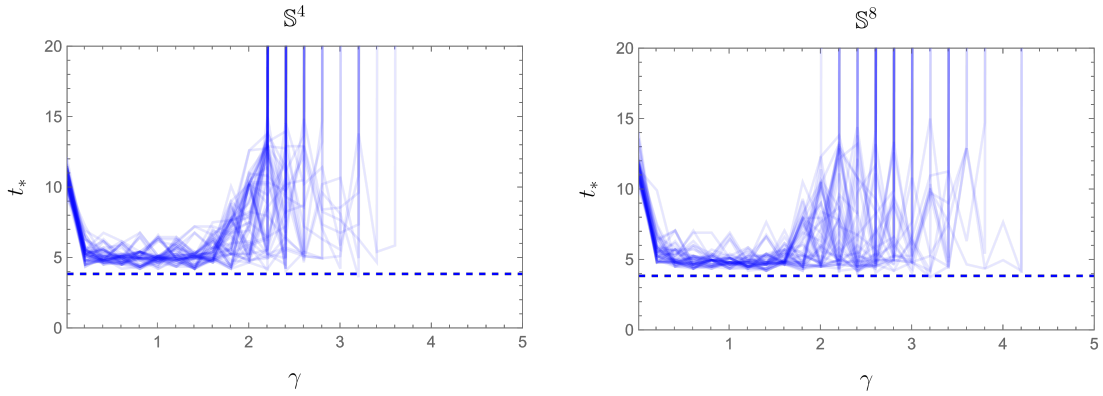


图7：收敛时间 t_* 与 γ之间的关系。左图为$N = 5$的结果，右图为 $N = 9$的结果。蓝色点线表示不等式（5.10）中的下界。

100 条蓝色曲线，对应于矩阵 A 和不同初始条件的选择。蓝色虚线表示不等式（4.38）中的下界（具体而言，是方程（5.10）中的下界）。因此，尽管微分方程（C.1）包含诸如 Γ^i_{jk} 和 V_{eff} 这样的非线性项，但我们发现，收敛时间满足不等式（4.38）和（5.10）。

参考文献

[AGFM81] L. Alvarez-Gaume、D. Z. Freedman 和 S. Mukhi，《超对称非线性σ模型的背景场方法与紫外结构》，《物理年鉴》134（1981）85。[Ama96] S.-i. Amari，结构化参数空间中的神经学习——自然黎曼梯度，载于《神经信息处理系统进展》，M. Mozer、M. Jordan 和 T. Petsche 编，第 9 卷。麻省理工学院出版社，1996 年。https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/1996/file/39e4973ba3321b80f37d9b55f63ed8b8-Paper.pdf。[AOBL19] F. Alimisis、A. Orvieto、G. B'ecigneul 和 A. Lucchi，黎曼优化中加速建模的连续时间视角，载于《人工智能与统计国际会议》。2019 年。1910。10782 [math.OC]。https://api.semanticscholar.org/CorpusID:204852166。[ATS03] D. Aharonov 和 A. Ta-Shma，绝热量子态生成与统计零知识，载于第 35 届 ACM计算理论研讨会年会。1，2003 年。quant-ph/0301023。[BACS07] D. W. Berry、G. Ahokas、R. Cleve 和 B. C. Sanders，高效的稀疏哈密顿量模拟量子算法，《数学物理通讯》270，第 2 期（2007）359–371 [quant-ph/0508139]。[BC12] D. W. Berry 和 A. M. Childs，黑箱哈密顿量模拟与酉实现，《量子信息与计算》12，第 1–2 期（2012）0029–0062 [0910。4157[quant-ph]]。

[BCV17] F. Bastianelli、O. Corradini 和 E. Vassura，弯曲空间中的量子力学路径积分与 A 型迹反常，JHEP 04（2017） 050 [1702。04247[hep-th]]。[BRS+16] A. R. Brown、D. A. Roberts、L. Susskind、B. Swingle 和 Y. Zhao，全息复杂度等于体作用量？《物理评论快报》116，第 19 期（2016）191301[1509。07876 [hep-th]]。[CHW+25] S. Chakrabarti、D. Herman、J. Watkins、E. Fontana、B. Augustino、J. L. Kim 和 M. Pistoia，通过量子动力学实现凸优化加速，2503。24332 [quant-ph]。[CK11] A. M. Childs 和 R. Kothari，利用星形分解模拟稀疏哈密顿量，《计算机科学讲义》6519（2011）94–103 [1003。3683[quant-ph]]。[CLVBY24] D. Camps、L. Lin、R. Van Beeumen 和 C. Yang，某些稀疏矩阵分块编码的显式量子电路，《工业与应用数学学会矩阵分析与应用杂志》45，第 1 期（2024）801–827 [2203。10236 [quant-ph]]。[CLW+25] Z. Chen、Y. Lu、H. Wang、Y. Liu 和 T. Li，用于优化的量子朗之万动力学，《数学物理通讯》406，第 3 期（2025）52。[CSW25] A. B. Catli、S. Si mon 和 N. Wiebe，通过动力学模拟实现量子优化的指数级更优界，2502。04285 [quant-ph]。[DeW64] B. S. DeWitt，群与场的动力学理论，《会议论文集 C》630701（1964）585–820。[DeW67] ,量子引力理论。2. 显然协变理论，《物理评论》162（1967）1195–1239。[DT88] J. C. D'Olivo 和 M. Torres，弯曲空间中的正则形式与路径积分，《物理学杂志 A：数学与理论》21，第 16 期（1988 年 8 月）3355。[EAS98] A. Edelman、T. A. Arias 和 S. T. Smith，具有正交约束的算法几何，《工业与应用数学学会矩阵分析与应用杂志》20，第 2 期（1998）303–353 [physics/9806030]。[Esc25] J. A. M. Escalante，基于开放量子系统维格纳表述的连续时间极限量子随机梯度下降，2510.25910[quant-ph]。[FHS10] R. P. Feynman、A. R. Hibbs 和 D. F. Styer，《量子力学与路径积分：修订版》。Dover 出版社，2010 年。[Gab82] D. Gabay，在微分流形上最小化可微函数，《优化理论与应用杂志》37（1982）177–219。https://api.semanticscholar.org/CorpusID:120623235。[GAW19] A. Gily´en、S. Arunachalam 和 N. Wiebe，通过更快的量子梯度计算优化量子优化算法，载于《……》

第三十届 ACM-SIAM离散算法研讨会，页码 1425–1444，工业与应用数学学会。2019。1711.00465 [量子物理].[Gil75] P. B. Gilkey，《黎曼流形的谱几何》，微分几何杂志 10 卷第 4 期，(1975) 601–618。[GJ76] J.-L. Gervais 和 A. Jevicki，《路径积分中的点正则变换》，《核物理B》110 (1976) 93–112。[GSLW18] A. Gily´en、Y. Su、G. H. Low 和 N. Wiebe，《量子奇异值变换及其进阶：量子矩阵运算的指数级改进》，载于第 51 届 ACM SIGACT计算理论研讨会。6，2018。1806.01838 [量子物理].[Ita13] T. Itami，《基于允许能量耗散的实时间量子动力学的全局优化》，《电气学会论文志C（电子、信息与系统部门志）》133 卷第 5 期，(2013) 985–993。[Kab24] A. Kabir，《使用 Crank-Nicolson 方法数值模拟含时薛定谔方程》，2410.10060 [physics.gen-ph].[KAL+25] T. Kharazi、A. M. Alkadri、J.-P. Liu、K. K. Mandadapu 和 K. B. Whaley，《多体椭圆算子边值问题的显式块编码》，《Quantum》9 (2025) 1764 [2407.18347 [量子物理]].[KBB15] W. Krichene、A. Bayen 和 P. L. Bartlett，《连续时间和离散时间中的加速镜像下降》，载于《神经信息处理系统进展》，C. Cortes、N. Lawrence、D. Lee、M. Sugiyama 和 R. Garnett 编，第 28 卷。Curran Associates, Inc.，2015。[KLP+24] S. Kushnir、J. Leng、Y. Peng、L. Fan 和 X. Wu，《QHDOPT：使用量子哈密顿下降进行非线性优化的软件》，2409.03121[量子物理].[KSB19] M. Kieferov´a、A. Scherer 和 D. W. Berry，《利用截断戴森级数模拟含时哈密顿量的动力学》，《物理评论A》99 卷第 4 期，(2019) 042314 [1805.00582 [量子物理]].[LC17] G. H. Low 和 I. L. Chuang，《通过量子信号处理实现最优哈密顿量模拟》，《物理评论快报》118 卷第 1 期，(2017) 010501 [1606.02685 [量子物理]].[LHLW23] J. Leng、E. Hickman、J. Li 和 X. Wu，《量子哈密顿下降》，2303.01471 [量子物理].[LLPW24] J. Leng、J. Li、Y. Peng 和 X. Wu，《通过哈密顿量嵌入扩展可通过硬件高效操控的希尔伯特空间》，arXiv 预印本 arXiv:2401.08550 (2024) 。[LS25] J. Leng 和 B. Shi，《通过基于梯度的哈密顿下降实现量子优化》，载于第 42 届国际机器学习会议。5，2025。2505.14670 [量子物理].[Lue72] D. G. Luenberger，《沿测地线的梯度投影法》，《管理科学》18 卷第 11 期，(1972) 620–631。http://www.jstor.org/stable/2629156。[LW18] G. H. Low 和 N. Wiebe，《相互作用绘景中的哈密顿量模拟》，

1805.00675 [量子物理].[*LWWZ*25] *J. Leng*、*K. Wu*、*X. Wu* 和 *Y. Zheng*，《优化的（亚）指数级量子加速》，*2504*.14841 [量子物理].[*LZW*23] *J. Leng*、*Y. Zheng* 和 *X. Wu*，《非凸优化中的量子-经典性能分离》，*2311*.00811 [量子物理].[*Mac*99] *R. MacKenzie*，《路径积分方法及其应用》，载于第六届越南国际物理学校。*12*，*1999*。*quant-ph/0004090*。[*Miz*75] *M. M. Mizrahi*，《韦尔对应与路径积分》，《数学物理杂志》*16 (1975) 2201–2206*。[*Muk*86] *S. Mukhi*，《非线性σ模型中的几何背景场方法、重整化与 *Wess-Zumino*项》，《核物理*B*》*264 (1986) 640–652*。[*OS*72] *M. Omote* 和 *H. Sato*，《非线性系统的量子力学》，《理论物理进展》*47 (1972) 1367–1377*。[*PCSZ*25] *S. Peng*、*S. Chen*、*X. Sun* 和 *H. Zhou*，《随机量子哈密顿下降》，*2507*.15424 [量子物理].[*Pod*28] *B. Podolsky*，《保守系统的正确量子力学哈密顿函数形式》，《物理评论》*32 (1928) 812–816*。[*PS*95] *M. E. Peskin* 和 *D. V. Schroeder*，《量子场论导论》。*Addison-Wesley*，美国雷丁，*1995*。[*Ros*60] *J. B. Rosen*，《非线性规划的梯度投影法。第一部分：线性约束》，《工业与应用数学学会期刊》*8* 卷第 *1* 期，*(1960) 181–217*。[*Ros*61] ，《非线性规划的梯度投影法。第二部分：非线性约束》，《工业与应用数学学会期刊》*9* 卷第 *4* 期，*(1961) 514–532*。[*Ros*97] *S. Rosenberg*，《黎曼流形上的拉普拉斯算子：流形上的分析导论》。伦敦数学学会学生教材。剑桥大学出版社，*1997*。[*Sak*85] *B. Sakita*，《多变量系统与场的量子理论》，第 *1* 卷。*1985*。[*Sat*77] *M.-a. Sato*，《路径积分形式中的算符排序与微扰展开》，《理论物理进展》*58 (1977) 1262*。[*SBC*15] *W. Su*、*S. Boyd* 和 *E. J. Candes*，《用于建模 *Nesterov*加速梯度法的微分方程：理论与见解》，*1503*.01243 [*stat.ML*].[*SGS*$^+$25] *Y. Suzuki*、*M. Gluza*、*J. Son*、*B. H. Tiang*、*N. H. Y. Ng* 和 *Z. Holmes*，《*Grover*算法是虚时间演化的一种近似》，*2507*.15065 [量子物理].[*SIKC*20] *J. Stokes*、*J. Izaac*、*N. Killoran* 和 *G. Carleo*，《量子自然梯度》，《*Quantum*》*4 (2020)* 269 [1909.02108 [量子物理]]。

[SKY+25] Y. Sato、J. Kato、H. Yano、K. Ito 和 N. Yamamoto，《偏微分方程约束优化的显式块编码》，2511.14420 [量子物理].[Smi14] S. T. Smith，《黎曼流形上的优化技术》，1407.5965[math.OC].[SS25] A. Sturm 和 N. Schillo，《拉普拉斯算子有限差分离散化的高效显式块编码》，2509.02429 [量子物理].[SSZ21] J. M. Sanz-Serna 和 K. C. Zygalakis，《若干优化算法的李雅普诺夫函数与微分方程之间的联系》，SIAM 数值分析杂志 59 卷第 3 期，（2021）1542–1565 [2009.00673 [math.NA]].[WRJ16] A. C. Wilson、B. Recht 和 M. I. Jordan，《优化中动量方法的李雅普诺夫分析》，1611.02635 [math.OC].[WRJ21] A. C. Wilson、B. Recht 和 M. I. Jordan，《优化中加速方法的李雅普诺夫分析》，机器学习研究杂志 22 卷第 113 期，（2021）1–34。http://jmlr.org/papers/v22/20-195.html.[WW15] A. Wibisono 和 A. C. Wilson，《论优化中的加速方法》，1509.03616 [math.OC].[WWJ16] A. Wibisono、A. C. Wilson 和 M. I. Jordan，《优化中加速方法的变分视角》，美国国家科学院院刊 113 卷第 47 期，（2016）E7351–E7358 [1603.04245 [math.OC]].[Yam19] N. Yamamoto，《变分量子本征求解器的自然梯度》，1909.05074 [量子物理].[ZS16] H. Zhang 和 S. Sra，《测地凸优化的一阶方法》，载于《学习理论会议》，第 1617–1638 页，PMLR，2016。1602.06053[math.OC].[ZS18] ，《迈向黎曼加速梯度方法》，1806.02812 [math.OC]。