arXiv:2611.32902v1 [quant-ph] 24 Nov 2026

用于在粒子数守恒酉算符下模拟费米子可观测量的狄拉克传播

G Arnav Naidu [1], * Matteo D'Anna [1], * Adrián Pérez-Salinas [1,2,3], Jannes Nys [1] and Juan Carrasquilla [1]
[1] Institute for Theoretical Physics, ETH Zürich, 8093 Zürich, Switzerland
[2] Quantum Mathematics, Algorithms and Machine Intelligence (QUMAMI), UPM, Spain
[3] Universidad Politécnica de Madrid, Spain

模拟相互作用费米子的动力学仍然是物理学和化学领域的核心计算挑战。我们引入狄拉克传播这一经典方法，用于模拟受粒子数守恒酉算符作用的费米子系统中的局域可观测量。我们证明，在算符展开中，权重大于总粒子数的字符串可以被丢弃，而不会对最终期望值造成任何误差。这一精确截断使得在固定粒子数下，保留字符串的数量关于模式数呈多项式增长，即使对于相互作用动力学也是如此。该形式体系将紧凑表示与相互作用门的显式表达式相结合，并对守恒粒子数的费米子高斯酉算符和 Clifford 酉算符进行精确处理。这一框架为模拟费米子多体动力学以及对费米子量子电路进行经典基准测试提供了一种方法。

I. 引言

预测相互作用费米子的动力学是物理学和化学领域共同面临的核心计算挑战 [1–8]。然而，这些动力学为理解关联材料中的热化 [9–12], 、分子中的超快电荷重新分布 [13–15],以及磁序的光学调控 [16–19], 提供了宝贵的物理学洞见 [20–22]，同时也能够获取激发谱 [23–25]。模拟费米–哈伯德模拟器的最新进展 [26]以及用于数字费米子量子计算的原生门，推动了可靠的费米子物质经典模拟的发展，以作为态制备和动力学的基准。

这些应用需要测量或预测含时可观测量，例如密度、电流、自旋关联和偶极矩。海森堡表象方法近来已成为研究此类局域可观测量动力学的有效途径。稀疏泡利动力学，或称泡利传播（PP） [27–30], 通过将海森堡表象中的算符展开为泡利基，直接演化可观测量本身。该方法最初用于模拟多量子比特动力学和量子电路 [28, 31, 32], ，后来通过马约拉纳传播（MP）扩展到费米子自由度。除此之外，PP 和 MP 还被用于变分场景，以制备量子比特系统和费米子系统的基态 [35–38]。尽管相互作用会生成规模不断增大的展开式，使这些方法在数值上变得不可行，但通过截断展开，可以限制算符增长。

在此，我们介绍狄拉克传播（DP）这一形式体系，专门用于模拟作用于具有固定费米子数的态、且守恒粒子数的动力学。这类动力学在费米子模拟中无处不在，涵盖从晶格模型到分子系统。我们的方法将可观测量展开为按规范排序的费米子狄拉克算子乘积，并基于近期的理论进展建立精确的变换规则 [39, 40]。

我们表明，对于含有 N 个费米子的系统，若 $N \in \mathcal{O}(1)$，狄拉克传播形式可给出精确结果，且所需项数随费米子模式数 M 呈多项式增长

$$T_N = \sum_{q=0}^{\min(N,M-N)} \binom{M}{q}^2 \in \tilde{\mathcal{O}}\left(M^{2\min(N,M-N)}\right), \quad (1)$$

而一般传播算法则呈指数增长 [29, 33]。为确立这种更有利的尺度关系，我们引入狄拉克权重的概念，并表明，对于含有 N 个粒子的初态，狄拉克权重大于 N 的贡献可以舍弃，而不会影响最终期望值。当 N 是 M 的恒定填充率时，尺度关系将变为指数增长。

此外，我们表明，在这一计算框架中，粒子数守恒的费米子高斯旋转也可实现对有界权重可观测量的精确传播 [41]。我们使用狄拉克传播模拟二维费米-哈伯德模型在不同相互作用区间的动力学，并对一个分子系统进行淬火模拟，其基组大小逐渐增加。结合理论发现，这些结果表明，狄拉克传播能够为模拟粒子数守恒费米子系统的演化提供可靠估计。

本文的组织结构如下。第II节介绍狄拉克传播的形式体系。第III节研究该形式体系的计算复杂度。我们在第IV。最后，我们在第V节总结全文。

* 这些作者对本研究的贡献相同。

II. 方法论

我们着重计算初始态密度算符 ρ 在含有 N 个费米子和 M 个模式的系统中，经粒子数守恒酉算符 U 演化后，粒子数守恒局域可观测量 O 的期望值。在这些限制条件下，福克空间分解为固定粒子数扇区，如下所示

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^{M} \mathcal{F}_N. \tag{2}$$

与 PP 和 MP 方法类似，狄拉克传播通过在算符基底中展开可观测量来表示并传播它们。具体而言，我们使用狄拉克算符字符串，记作 $\eta(v)$，并在第 IIA节中引入，用来表示可观测量：

$$O = \sum_v c_v \eta(v).$$

在海森堡演化下，演化后的可观测量可写为

$$O(t) \equiv U^\dagger(t) O U(t) = \sum_v c_v(t) \eta(v), \tag{3}$$

其中系数为 $c_v(t) \in \mathbb{C}$。对于含有 N 个费米子的初态 ρ，其随时间变化的期望值 $\langle O \rangle_t$ 为

$$\langle O \rangle_t \equiv \mathrm{Tr}_N[\rho O(t)] = \sum_v c_v(t) \,\mathrm{Tr}_N[\rho \eta(v)], \tag{4}$$

其中，Tr_N 表示限制在福克空间 N 粒子子空间 $\mathcal{F}_N$ 上的迹。

为确保计算上的可行性，我们将该方法限定于具有稀疏表示的可观测量 O，即非零项至多为 $\mathcal{O}(\mathrm{poly}(M))$。此类稀疏算符的例子包括局域可观测量。

A. 表示

现在，我们使用费米子狄拉克算符引入狄拉克基。考虑福克空间 $\mathcal{F}$，它由 M 个按固定模式顺序排列的费米子模式组成 $1 < \cdots < M$。费米子产生与湮灭算符 $f_k^\dagger$，f_k(也称为狄拉克算符 [42]) 满足

$$\{f_j, f_k^\dagger\} = \delta_{jk}\mathbb{I}, \qquad \{f_j, f_k\} = \{f_j^\dagger, f_k^\dagger\} = 0, \tag{5}$$

其中下标表示相应的费米子模式。每个模式的数算符为 $n_k = f_k^\dagger f_k$ ^，总数算符为 $N = \sum_k n_k$。守恒粒子数的酉算符 U 满足条件 $[U, \hat{}N] = 0$。

1. *Canonical form*

我们为狄拉克算符引入一种典范形式，使每个算符都有唯一的表示。我们首先讨论只有一个费米子模式的情况。集合 $\{0, \mathbb{I}, f, f^\dagger, ff^\dagger, f^\dagger f\}$ 具有以下乘法表（行 $\times$ 列）

	0	$\mathbb{I}$	f	$f^\dagger$	$ff^\dagger$	$f^\dagger f$
0	0	0	0	0	0	0
$\mathbb{I}$	0	$\mathbb{I}$	f	$f^\dagger$	$ff^\dagger$	$f^\dagger f$
f	0	f	0	$ff^\dagger$	0	f
$f^\dagger$	0	$f^\dagger$	$f^\dagger f$	0	$f^\dagger$	0
$ff^\dagger$	0	$ff^\dagger$	f	0	$ff^\dagger$	0
$f^\dagger f$	0	$f^\dagger f$	0	$f^\dagger$	0	$f^\dagger f$

(6)

例如，$f \times ff^\dagger = f^2 f^\dagger = 0$。这种结构构成一个幺半群。幺半群与群的主要区别在于，幺半群中并非所有元素在该集合中都有逆元。我们从幺半群中选取一组元素，构造单模式费米子系统的一个（非正交）基

$$\mathcal{D}_1 = \{\mathbb{I}, f, f^\dagger, n = f^\dagger f\}. \tag{7}$$

我们将 $\mathcal{D}_1$ 称为局部典范狄拉克算符基。该基 $\mathcal{D}_1$ 对算符施加典范排序，其中我们将 $ff^\dagger$ 表示为

$$ff^\dagger = \mathbb{I} - n. \tag{8}$$

对于具有 M 个费米子模式的系统，我们引入狄拉克算符字符串

$$\eta(v) = (f_1^\dagger)^{v_1} (f_1)^{v_2} \cdots (f_M^\dagger)^{v_{2M-1}} (f_M)^{v_{2M}}, \tag{9}$$

由 $2M$ 位比特串 $v \in \{0,1\}^{2M}$ 进行索引。这使我们能够描述正则算符基

$$\mathcal{D}_M = \{\eta(v) : v \in \{0,1\}^{2M}\}. \tag{10}$$

每个字符串还对应一个单项式（产生与湮灭算符的单个有序乘积），而我们将狄拉克展开 一词用于此类元素的线性组合。由于我们关注数目守恒的可观测量和酉算符，狄拉克算符串将包含数量相等的产生算符和湮灭算符。此类粒子守恒算符空间的一组基为

$$\mathcal{B}_M = \left\{ \eta(v) \in \mathcal{D}_M : \sum_{k=1}^{M} v_{2k-1} = \sum_{k=1}^{M} v_{2k} \right\}. \tag{11}$$

中的字符串 $\mathcal{D}_M$，$\mathcal{B}_M$ 并不正交；详见附录B 3。

2. *Dirac-weight*

不同于泡利权重或马约拉纳权重 [29, 33]，，我们为狄拉克串及其展开定义了一种新的权重，以解释我们方法更优的缩放行为。

定义 1. 我们将字符串 $\eta(v) \in \mathcal{B}_M$ 的狄拉克权重 $w(\eta(v))$ 定义为其中湮灭算符的数量 f_k

$$w(\eta(v)) \equiv w(v) = \sum_{k=1}^{M} v_{2k}. \tag{12}$$

我们也将狄拉克权重简称为权重。

定义 2. 对于守数狄拉克展开$G = \sum_v c_v \eta(v)$，我们将其狄拉克权重定义为

$$w(G) := \min_{v|c_v \neq 0} w(\eta(v)). \tag{13}$$

对于包含 s 种费米子的情况（例如具有不同投影的费米子），我们将福克空间写作

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N_1=0}^{M_1} \cdots \bigoplus_{N_s=0}^{M_s} \mathcal{F}_{N_1,\cdots,N_s}, \tag{14}$$

其中 $\mathcal{F}_{N_1,\cdots,N_s}$ 是具有 N_j 个j种类 M_j 粒子的子空间，并且 j是种类 的模式数。狄拉克串（9）通过对 $S_j \subset [M]$ 个模式任意排序构造。令 j为种类 w_j的模式指标集。我们将狄拉克串$v(\eta)$ 的每种粒子权重 v定义为与种类 f_k 相关联的模式 k 上的湮灭算符 j的数量，

$$w_j(v) = \sum_{k \in S_j} v_{2k}. \tag{15}$$

我们将这种每种粒子的权重称为 j-权重。

3. *Overlap with Fock states*

传播可观测量后，计算式（4）需要求狄拉克串与初始态之间的重叠。这里我们聚焦于常见的福克态情形。考虑狄拉克串 $\eta(v) \in \mathcal{B}_M$，并令$I = \{k : v_{2k} = 1\}$ 和 $J = \{k : v_{2k-1} = 1\}$ 分别为其湮灭模和产生模的指标集。令 $K = \{k_1, \cdots, k_p\}$ 和 $L = \{l_1, \cdots, l_q\}$ 为两个福克态中记录占据模的指标集，两个福克态分别为（$k_1 < \ldots < k_p$）和（$l_1 < \ldots < l_q$）

$$\begin{aligned} |K\rangle &= f_{k_1}^\dagger \cdots f_{k_p}^\dagger |0\rangle \\ |L\rangle &= f_{l_1}^\dagger \cdots f_{l_q}^\dagger |0\rangle . \end{aligned} \tag{16}$$

矩阵元的表达式为

$$|\langle K|\eta(v)|L\rangle| = \begin{cases} 1 & \text{if } I \subseteq L \text{ and } J \subseteq K \text{ and } L\backslash I = K\backslash J \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{17}$$

根据权重的定义，很自然可以看出，任何权重为 $w(\eta(v)) > |L|$ 的字符串都会给出 $I \nsubseteq L$。此外，由于 $\eta(v) \in \mathcal{B}_M$，$|I| = |J| = w(\eta(v))$，我们得到

$$\langle K|\eta(v)|L\rangle = 0 \quad \text{if } w(\eta(v)) > \min(|K|, |L|). \tag{18}$$

因此，如果 ρ是一个具有 N 个粒子的初态 es,

$$\mathrm{Tr}(\eta(v)\rho) = 0 \quad \text{if } w(\eta(v)) > N. \tag{19}$$

换句话说，狄拉克展开中权重大于 N 的所有项都不会对期望值（4）作出贡献，正如我们将在第IIIA节中更详细地讨论的那样。

B. 传播规则

在介绍了狄拉克基之后，我们现在回到任务（3），即在海森堡绘景中传播受幺正 U 作用的可观测量。就狄拉克基展开而言，我们使用伴随作用指数项的表达式（其中 $\mathrm{ad}_X(Y) = [X, Y]$）[43]

$$\begin{aligned} e^X Y e^{-X} &= e^{\mathrm{ad}_X} Y \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathrm{ad}_X^n(Y) \end{aligned} \tag{20}$$

为了传播一个典范狄拉克串 $\eta(v) \mapsto U^\dagger \eta(v) U$，我们考虑一个由单个狄拉克串 $\eta(g)$构造的厄米生成元

$$G_+(g) \equiv \eta(g) + \eta(g)^\dagger \tag{21}$$

$$G_-(g) \equiv -\mathrm{i}(\eta(g) - \eta(g)^\dagger), \tag{22}$$

其中 $\eta(g) \in \mathcal{B}_M$，并引入

$$U_\pm \equiv e^{-\mathrm{i}\theta G_\pm(g)}.$$

对于规范字符串 $\eta(v)$，嵌套对易子满足 [39]

$$\mathrm{ad}_{G_\pm}^3\left(\eta(v)\right) = \kappa\, \mathrm{ad}_{G_\pm}\left(\eta(v)\right), \qquad \kappa \in \{1, 4\}, \tag{23}$$

其中 κ 的适当取值取决于生成器和传播的字符串；参见附录C。这一闭合性使得（20）可以精确地重新求和，从而得到狄拉克传播分裂规则 [39, 40]

$$\begin{aligned} U_\pm^\dagger \eta(v) U_\pm = \eta(v) &+ \mathrm{i}\frac{\sin(\sqrt{\kappa}\theta)}{\sqrt{\kappa}}[G_\pm, \eta(v)] \\ &+ \frac{\cos(\sqrt{\kappa}\theta) - 1}{\kappa}[G_\pm, [G_\pm, \eta(v)]]. \end{aligned} \tag{24}$$

与生成元对易的字符串保持不变。否则，其演化完全由前两个嵌套对易子决定，三角函数系数则涵盖了所有更高阶项。因此，演化后的算符属于 $\eta(v)$、$[G_\pm, \eta(v)]$, and 的张成空间。

$[G_\pm,[G_\pm,\eta(v)]]$。注意，每个对易子可能包含多个狄拉克串。此外还要注意，将闭式（24）按 θ 的幂展开，其中 $\sin\theta=\theta+\mathcal{O}(\theta^3)$和 $1-\cos\theta=\frac{\theta^2}{2}+\mathcal{O}(\theta^4)$，可以看到，一个典范狄拉克串会被拆分为其自身，以及阶数为 θ或更高阶的附加项。

a. 示例。作为狄拉克传播分裂规则的一个具体示例，我们考察密度-密度相互作用 $U_{nn}=\exp(-\mathrm{i}\theta n_i n_j)$ 作用于产生算符时引起的旋转。我们得到

$$U_{nn}^\dagger f_k^\dagger U_{nn}=\begin{cases} f_i^\dagger+\left(e^{\mathrm{i}\theta}-1\right)f_i^\dagger n_j, & k=i,\\ f_j^\dagger+\left(e^{\mathrm{i}\theta}-1\right)f_j^\dagger n_i, & k=j,\\ f_k^\dagger, & k\notin\{i,j\},\end{cases}\tag{25}$$

因为对易子为

$$[n_in_j,f_i^\dagger]=f_i^\dagger f_i f_j^\dagger f_j f_i^\dagger-\underbrace{f_i^\dagger f_i^\dagger f_i f_j^\dagger f_j}_{=0}=f_i^\dagger n_j\tag{26}$$

$$[n_in_j,[n_in_j,f_i^\dagger]]=[n_in_j,f_i^\dagger n_j]=f_i^\dagger n_j\tag{27}$$

因此（24）（$\kappa=1$）得到了所述表达式（25）。注意，只需考虑演化单个产生算符的情况，因为 U 对一般狄拉克串的作用可以分解为对单个产生算符和湮灭算符的作用

$$U^\dagger\eta(v)U=\prod_{k=1}^{M}\left(U^\dagger f_k^\dagger U\right)^{v_{2k-1}}\left(U^\dagger f_k U\right)^{v_{2k}}.\tag{28}$$

附录 C 给出了其他典型费米子相互作用的分裂规则的明确表达式。

b. 与马约拉纳基的比较。我们将式（24）中的狄拉克分裂规则与马约拉纳传播分裂规则 [33]进行比较。后者可由相同的重求和得到：对于两个反对易的厄米马约拉纳串 $\mu(v)$ 和 $\mu(\tilde v)$，生成元$G=\mu(\tilde v)/2$ 满足 $G^2=1/4$ 和 $\{G,\mu(v)\}=0$，因此 $[G,[G,\mu(v)]]=4G^2\mu(v)=\mu(v)$。由此可得 $\kappa=1$，双重对易子归结为原始字符串，并且

$$e^{\mathrm{i}\theta\mu(\tilde v)/2}\,\mu(v)\,e^{-\mathrm{i}\theta\mu(\tilde v)/2}=\cos(\theta)\,\mu(v)+\mathrm{i}\sin(\theta)\,\mu(\tilde v)\mu(v),\tag{29}$$

其中 $\mathrm{i}\mu(\tilde v)\mu(v)=\pm\mu(v+\tilde v)$仍然是一个马约拉纳串。因此，一个不对易的马约拉纳旋转会将一个字符串拆分成两个。在狄拉克传播中，生成元的平方并非单位算符的倍数。每当 $\eta(g)$包含一个未配对的产生或湮灭算符时，$\eta(g)^2=0$ 和 $G_\pm^2=\eta(g)\eta(g)^\dagger+\eta(g)^\dagger\eta(g)$就是投影算符之和。因此，与 MP 情况不同，狄拉克字符串 $\eta(v)$通常不是 $\mathrm{ad}_{G_\pm}^2$的本征算符。

对于跃迁生成元 $G=f_1^\dagger f_2+f_2^\dagger f_1$和 $\eta(v)=n_1$，例如，可以得到 $[G,[G,n_1]]=2(n_1-n_2)$。因此，双重对易子会生成不同于$\eta(v)$的字符串，并且（24）中的全部三项都必须保留。

III. 复杂度

A. 权重单调性

权重 $w(v)$ 12）对于降低期望值模拟（4的复杂度至关重要。对于狄拉克展开而言，这是狄拉克展开产生非平凡作用的最小粒子扇区，正如我们在附录 A中所证明的那样。

此外，狄拉克基还具有以下重要性质：若考虑作用于狄拉克展开 G 的数目守恒幺正演化，其中 $w(G)=k$，则权重保持不变，即

$$w(U^\dagger GU)=w(G)=k.\tag{30}$$

虽然（30）保证 $U^\dagger GU$ 中至少存在一个权重为 k的字符串，但其中通常还会包含权重高于 k的字符串；见图 1。我们在附录 A中证明这一结论。

总的来说，（19）和（30）保证了在演化的任意时刻，我们都可以丢弃权重为$w(v)>N$ 的字符串，而不会产生任何近似误差：任何具有

$$w(v)>N$$

只会产生其他权重为 v' 的字符串 ght

$$w(v')\geq w(v)>N.$$

我们将这种根据字符串权重丢弃字符串的策略称为权重截断。权重截断不会在期望值中引入任何误差，这一点与保利传播和马约拉纳传播形成鲜明对比；在后两者中，权重截断是一种启发式方法，其依据是高权重字符串与典型初始态之间的重叠很小（甚至为零）。此外，它还会引入“回流误差”：高权重字符串可以重新组合成低权重字符串 [29, 33, 34]。在狄拉克表示中不存在这种回流，因此能够对（4）作出贡献的项数有上界

$$\sum_{q=0}^{N}\binom{M}{q}^2\in\tilde{\mathcal{O}}\left(M^{2N}\right),\tag{31}$$

因此，对于 M 为 $N\in\mathcal{O}(1)$ 时，其呈多项式增长。对于高密度填充的情况，切换到空穴基（即将 $f^\dagger f$替换为 $ff^\dagger$）后，同样可以得到有利的标度。有关该过程的更多细节，请参见附录B4。因此，项数有上界

$$T_N=\sum_{q=0}^{\min(N,M-N)}\binom{M}{q}^2\in\tilde{\mathcal{O}}\left(M^{2\min(N,M-N)}\right).\tag{32}$$

虽然 MP 中的权重截断确实也会使字符串数量呈多项式增长，但

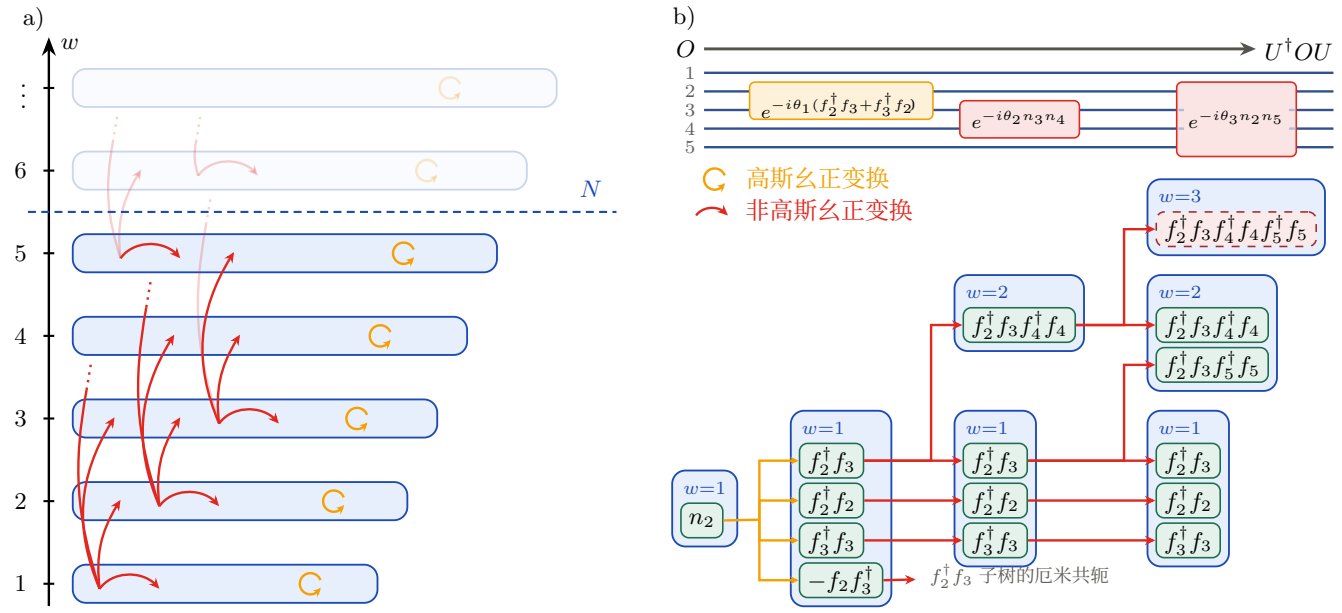

图 1. (a) 狄拉克传播中不存在回流的示意图。对于高斯幺正变换，狄拉克展开中字符串的权重是固定的。在一般的非高斯情形下，狄拉克展开中字符串的权重不减，但动力学会使字符串的权重增加。与 N粒子初态的重叠要求字符串 $\eta(v)$ 满足 $w(v) > N$，因此可以将其舍弃，而不会导致期望值产生任何近似误差。(b) 狄拉克传播中不存在回流及权重单调性的示意图。初始字符串 $n_2 = f_2^\dagger f_2$经过高斯门和四体门传播。狄拉克串按第 II A节中的典范排序书写。权重截断阈值设为 $w_{\max} = 2$，因此舍弃了最后一个门生成的权重为 3 的字符串。经过第一个跃迁门后，字符串 $f_2^\dagger f_3$和 $-f_2 f_3^\dagger = f_3^\dagger f_2$互为厄米共轭。由于海森堡演化是保伴随映射，它们的传播树也互为共轭，因此图中只画出其中一个。

高权重回流是具有挑战性的 MP 模拟的一个显著特征，并且仅针对随机非结构化量子线路进行了刻画 [34] 。另一方面，对于$N \in \mathcal{O}$（1），狄拉克传播同样会将其缩减为多项式标度，但可以证明回流并不存在。

如果我们考虑包含多种费米子的系统，并且要模拟的动力学分别守恒每种费米子的粒子数，那么权重单调性条件对每一种费米子 j 都分别成立

$$w_j(U^\dagger G U) = w_j(G). \tag{33}$$

附录A也包含这一论断的证明。

现在我们来研究狄拉克传播的两种高效情形：高斯量子线路和克利福德量子线路。

B. 精确高斯与克利福德模拟

a. 高斯动力学。现在我们将证明，在狄拉克形式中，对于受粒子数守恒高斯幺正变换作用的局域可观测量，其期望值可以高效模拟，而无需进行近似或截断。

考虑由一个 $M \times M$ 厄米单粒子矩阵$h = h^\dagger$ 生成的守粒子数高斯幺正算符。我们将相应的单粒子幺正矩阵定义为 $V_h(\theta) = e^{\mathrm{i}\theta h} \in U(M)$，而多体生成元和幺正旋转定义为

$$G(h) = \sum_{i,j=1}^{M} h_{ij} f_i^\dagger f_j, \qquad R_h(\theta) = e^{-\mathrm{i}\theta G(h)}. \tag{34}$$

由于 $G(h)$中的每一项都恰好包含一个产生算符和一个湮灭算符，因此 $R_h(\theta)$守恒粒子数。

记作 $V \equiv V_h(\theta)$，单个产生算符的海森堡作用为

$$R_h^\dagger f_i^\dagger R_h = \sum_{j=1}^{M} V_{ji} f_j^\dagger. \tag{35}$$

对于有序指标集 $I = (i_1 < \cdots < i_p$，插入 $\mathbb{I} = R_h R_h^\dagger$ 并利用（35）展开，得到

$$\begin{aligned} R_h^\dagger f_{i_1}^\dagger \cdots f_{i_p}^\dagger R_h &= \prod_{k=1}^{p} \left(\sum_{j_k=1}^{M} V_{j_k i_k} f_{j_k}^\dagger \right) \\ &= \sum_{j_1,\cdots,j_p} V_{j_1 i_1} \cdots V_{j_p i_p} (-1)^{s_J} f_{j_1}^\dagger \cdots f_{j_p}^\dagger \\ &= \sum_{j_1 < \cdots < j_p} \det(V_{J,I}) f_{j_1}^\dagger \cdots f_{j_p}^\dagger, \end{aligned} \tag{36}$$

其中，s_J 是将产生算符重新排序的排列的奇偶性，$V_{J,I}$ 是输出行为 J 、输入列为 I的子矩阵。因此，p 个产生算符映射为仅由含有 p 个产生算符的算符构成的线性组合。相应的仅含湮灭算符的公式可通过将 V 替换为 V^* 得到。因此，高斯旋转分别保持每个字符串中产生算符和湮灭算符的数量 p 和 q 不变。因此，由含有 p 个产生算符和 q 个湮灭算符的输入字符串生成的每个输出都具有相同的狄拉克权重q。规范输出字符串的可能数量上界为

$$\binom{M}{p}\binom{M}{q}. \tag{37}$$

对于此处考虑的守粒子数字符串，还成立 $p = q = w(v)$。这表明，当初始可观测量的狄拉克展开中，字符串的权重足够低时，即

$$O = \sum_{v:\, w(v)\le k} c_v \eta(v), \tag{38}$$

高斯动力学过程中相应的可能字符串数量为 $\sum_{i=0}^{k}\binom{M}{i}^2$，因此无需截断即可进行精确模拟。

b. Clifford 酉算符。参考文献 [33] 证明了，在马约拉纳基中进行海森堡绘景模拟，可以高效模拟两类量子线路：高斯量子线路和费米子 Clifford 电路。上文讨论了高斯模拟，接下来我们将研究 Clifford 酉算符。马约拉纳传播的分裂规则在概念上比 DP 分裂规则（24）更为直观：任何与马约拉纳旋转生成元反对易的字符串都会分裂成 2 个字符串。此外，对于任意权重的马约拉纳旋转，我们总能选择一个旋转角，使分裂成为一一映射。相比之下，DP 并非如此，因为已有研究表明，一般的狄拉克-Clifford 操作会排列指标，并交换湮灭算符和产生算符 [40]。由于我们将范围限定为守粒子数算符，因此只允许指标排列。由此，守粒子数的 Clifford 操作为

$$V_{ji} = e^{\mathrm{i}\phi_i}\delta_{j,\pi(i)}, \tag{39}$$

其中 $\pi(\cdot)$ 是模式的一种排列，而 ϕ_i 是任意相位。这些操作是高斯变换（35）的一个特例。具体而言，两类高斯旋转可以生成所有保粒子数的克利福德操作。第一类是在离散角度下进行的跃迁旋转，可交换位于站点 p 和 q的模式，

$$S_{pq} = \exp\left[-\frac{\pi}{2}\left(f_p^\dagger f_q - f_q^\dagger f_p\right)\right]. \tag{40}$$

第二类是任意的单模相位旋转，

$$D_p(\phi) = e^{-\mathrm{i}\phi n_p}, \tag{41}$$

其中 $\phi \in \mathbb{R}$。利用任意两位点交换（换位）都能生成置换群这一事实，我们可以得出结论：S_{pq} 和 $D_p(\phi)$共同生成了保数幺正算子空间的 Clifford 群，

$$\mathcal{C}_M = \langle \{S_{pq}, D_p(\phi) | p, q \in [M], \phi \in \mathbb{R}\}\rangle. \tag{42}$$

因此，保数 Clifford 更新是高斯传播的一个尤为简单的特例，即使对于任意权重的狄拉克串，也能保持高效。

IV. 实验

我们通过两项量子淬火后的动力学模拟，展示狄拉克传播的性能：（i）不同相互作用强度下的二维费米-哈伯德模型（第 IVA节）和（ii）轨道集合逐步扩大的氢化锂双原子分子（第 IVB节）。如下文所述，我们利用 Trotter 展开近似动力学 $\exp(-\mathrm{i}\delta\tau H)$，并采用第 IIIA节讨论的权重截断之外的其他截断策略。

a. Trotter 分解。本节考虑的两类哈密顿量均具有如下形式

$$H = \sum_v h_v(\eta(v) + \eta(v)^\dagger), \tag{43}$$

我们旨在通过二阶 Trotter 分解，在短时间间隔 $\delta\tau$ 内实现动力学幺正算符$U(\delta\tau) = \exp(-\mathrm{i}\delta\tau H)$

$$\begin{aligned}\exp(-\mathrm{i}\delta\tau H) \approx &\left(\prod_{l=1}^{L}\exp\left(-\mathrm{i}\theta_l(\eta(v_l)+\eta(v_l)^\dagger)\right)\right)\cdot\\ &\left(\prod_{l=L}^{1}\exp\left(-\mathrm{i}\theta_l(\eta(v_l)+\eta(v_l)^\dagger)\right)\right),\end{aligned} \tag{44}$$

其中 $\theta_l = \delta\tau h_l/2$。

b. 不同种类的权重截断。我们考虑的两类哈密顿量都包含自旋费米子，并且都保持自旋。对于在这类保持自旋的哈密顿量作用下模拟含有 $N_\uparrow$，$N_\downarrow$ 个费米子的系统，(33) 保证我们可以分别对每种粒子的权重 $w_{\uparrow,\downarrow}$进行权重截断，也就是说，丢弃满足以下条件的字符串 $\eta(v)$

$$w_{\uparrow,\downarrow}(v) > N_{\uparrow,\downarrow} \tag{45}$$

而不会产生任何近似误差。请注意，这比截断字符串的标准更严格，截断字符串时

$$w(v) > N_\uparrow + N_\downarrow.$$

在这种情况下，我们发现项数的上界更紧$T_{N_\uparrow,\ N_\downarrow}$ 比一般情况下的上界 T_N（见式32）

$$T_{N_\uparrow,N_\downarrow} = \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{q=0}^{\min(N_\sigma, M_\sigma - N_\sigma)} \binom{M_\sigma}{q}^2. \tag{46}$$

c. 额外截断。虽然权重截断提供了精确的解析保证，但为了在实践中进行模拟，我们引入了两种额外的截断方案：系数截断和非配对截断。这些截断方案旨在提供额外的“截断旋钮”，以进一步降低模拟的计算复杂度，但代价是期望值会产生近似误差。

系数截断是投影传播和矩阵乘积中常用的截断方案 [29, 33]。我们选取一个截断阈值 ε，并在模拟的任意时刻检查狄拉克展开（3）中的系数，并丢弃满足以下条件的字符串

$$|c_v| < \varepsilon. \tag{47}$$

在实践中，系数截断有助于大幅减少狄拉克展开中的字符串数量，但较大的 ε会导致更大的误差 Δ ，影响期望值。我们在附录D中推导了此类误差的上界，并证明其上界为

$$\Delta \le \sum_{l=0}^{L-1} \Delta_l, \tag{48}$$

其中， Δ_l 是一个逐门上界，可直接根据传播后的展开和丢弃项计算得到。

非配对截断依赖于字符串 $\eta(v)$的非配对权重 w_{unpaired} 这一概念

$$w_{\text{unpaired}}(v) = \sum_{k=1}^{M} \delta_{v_{2k-1} \neq v_{2k}}. \tag{49}$$

非配对权重表示字符串中的多少个模式分别仅包含 $f_k^\dagger$ 或 f_k 作为唯一算符。该概念最初是为 MP 在 [33], 中引入的，是一种针对涉及单个福克初态的期望值的截断方法$|K\rangle$ ，在式（16）的记号下，如下所示

$$\langle K|\eta(v)|K\rangle = 0 \quad \forall\ \eta(v) : w_{\text{unpaired}}(v) > 0. \tag{50}$$

这种截断方案背后的直觉是，虽然含有许多未配对模的字符串原则上可以通过变换再次变为完全配对的形式，但该变换产生的系数会变得非常小，因此可以忽略。

A. 晶格电子

我们考虑二维费米-哈伯德模型

$$H = -t \sum_{\langle i,j\rangle,\sigma\in\{\uparrow,\downarrow\}} \left(f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \tag{51}$$

在本节中，我们始终令 $\hbar = 1$ ，并以跃迁 t为能量单位，因此时间 τ 的单位为 $1/t$。我们模拟初态$|\psi_0\rangle$ 的演化，该初态由沿一条条纹排列的 D 个双占据组成，具体设置参见文献 [44]。令 $K_D = \{i_1, \cdots, i_D\}$为包含双占据位置的指标集，则

$$|\psi_0\rangle = f_{i_D\uparrow}^\dagger f_{i_D\downarrow}^\dagger \cdots f_{i_1\uparrow}^\dagger f_{i_1\downarrow}^\dagger |0\rangle . \tag{52}$$

我们考虑一个 6×6 具有周期性边界条件的晶格，并研究各种相互作用强度的影响。为此，我们模拟受费米-哈伯德哈密顿量（51）支配的 $U/t \in\{0, 1, 8\}$，其中最后一个进入了强关联区域，在该区域大多数经典方法都难以应对。

对于自由费米子，动力学表现出源于单粒子能谱可公度性的精确复现。这是因为最近邻色散关系为

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y), \tag{53}$$

其中 $k_{x,\ y} = 2\pi m_{x,\ y}/L$。对于 $L = 6$，允许的取值为 $\cos(k_{x,\ y}) \in \{1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1\}$，并且所有单粒子能量都是跃迁强度 t 的整数倍。这种谱可公度性意味着，对于 $U/t = 0$ 情形，我们在 $\tau_{\text{rev}} = 2\pi$ 处会出现精确复现，即我们有

$$e^{-\mathrm{i}H\tau_{\text{rev}}} = 1, \tag{54}$$

我们预计数值模拟也会展现这一特征。

在数值模拟中，我们追踪双占据的总数

$$N_d = \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \tag{55}$$

随时间演化。我们采用二阶 Trotter 分解（44），并使用 $\delta\tau = 0.1$，将系统模拟至 $\tau = 12$。我们考虑两种不同的淬火。在第一种淬火中，我们考虑一个具有 $D = 2$的条纹，该系统在所有相互作用强度下都可通过精确对角化（ED）处理；而对于第二种淬火，我们选择 $D = 6$ ，其在相互作用区间内无法通过 ED 处理。在相互作用区间内，我们将 DP 结果与使用 `MajoranaPropagation.jl` [45]获得的 MP 结果进行比较。在所展示的所有模拟中，DP 和 MP 运行均持续到达到可用计算集群的最大内存（约 1 TB 内存）为止；该内存可容纳具有 $\sim 10^{10}$ 个字符串的狄拉克展开和马约拉纳展开。

我们使用 DP 在不同的系数截断 $\varepsilon = 10^{-3}$、3×10^{-4}、10^{-4}下模拟淬火，并分别对两个自旋扇区施加权重截断，$N_{\uparrow,\downarrow} = D$，因为费米-哈伯德哈密顿量（51）保持自旋不变。对于具有 $D = 6$个双占据的模拟，我们还额外采用未配对权重截断。

a. $D = 2$的结果。图展示了 $U/t = 0$、1、8的结果2。我们使用 $\varepsilon = 10^{-3}$、3×10^{-4}、10^{-4}和10^{-14}模拟高斯动力学，最后一种方法用于展示DP可以精确模拟自由费米子动力学。我们观察到了态的精确复现（54），如 N_d 在 $\tau = 2\pi$处的峰所示。

在 $U/t = 1$ $\varepsilon = 3\times10^{-4}$处的 10^{-4}DP模拟与ED结果在定性上相符。特别是，ED预测的 N_d 中的峰出现在正确的时间。MP结果（$\varepsilon = 10^{-6}$）在较早时刻与ED和DP符合良好，但在较晚时刻变得非常不准确，并且所包含的字符串数量多于最精确的DP模拟。MP显著低估了复现峰。

在 $U/t = 8$ 这三个$\varepsilon = 10^{-3}$中，3×10^{-4}、10^{-4} 给出了与ED定性一致的结果，我们将早期时刻的差异归因于Trotter误差。我们注意到，在强相互作用区域，没有表现出自由费米子结果中精确复现的特征。由于能量守恒，分解一个双占据需要将巨大的相互作用能转化为动能，因此双占据数量在期间趋于稳定。另一方面，MP从开始就已经偏离ED和DP。近期研究表明，MP的计算复杂度与模拟的非高斯性有关。这使得模拟中的字符串数量增长速度快于 $U/t = 1$ 情形，而在实践中，很难找到既能准确估计期望值、又不会耗尽计算集群内存的截断策略。

b. $D = 6$的结果。、1 的结果如图 3 所示。我们使用$\varepsilon = 10^{-3}$、3×10^{-4}、10^{-4}、10^{-14}模拟高斯动力学，并且与之前一样，确认 DP 可以精确模拟高斯动力学。此处展示的相互作用区间结果还采用未配对权重截断 6 进行了截断。我们发现，DP 对 τ_{rev}处复现峰的捕捉更为准确，而 MP 模拟所需的字符串数量超过任何 DP 模拟，并且完全未能捕捉到该峰。模拟具有 6 个双占据的系统时，我们注意到，上界（46）给出 $T_{N_\uparrow,\,N_\downarrow} \approx 1.6\cdot10^{25}$个字符串，远超精确模拟的能力范围。

B. 孤立分子

当系统中有许多费米子模式，但只有少数费米子占据这些模式时，狄拉克传播的多项式标度尤其有利。分子系统是一个自然的应用对象，因为逼近完备基组极限意味着要模拟固定数量的 N 个电子，并使用包含 $M \gg N$ 个模式且规模不断增大的轨道集合。

表 I. LiH 淬火的基组：空间轨道数 n（$M = 2n$ 个模式）、每个 Trotter 步的基本门数 N_g，以及初态 $|\Phi_F\rangle$ 与 H_0 的精确基态 $|\phi_0\rangle$ 之间的重叠平方 $|\langle\phi_0|\Phi_F\rangle|^2$。

基组	n	M	N_g	$\lvert\langle\phi_0\lvert\Phi_F\rangle\rvert^2$
STO-3G	6	12	956	0.9744
6-31G	11	22	4 940	0.9584
6-31G*	16	32	13 972	0.9545
cc-pVDZ	19	38	17 360	0.9452

为说明这一点，我们模拟氢化锂，这是量子化学量子模拟中的标准基准体系。 [48, 49]，在固定核几何构型下，我们通过扩大基组来逼近连续统极限，同时保持电子数不变。

我们考虑这样一种情形：Li 原子核位于原点，H 原子核位于正 z 轴上，位置为$R = 1.60$ Å。所有 4 个电子均显式处理，不采用冻结芯层或活性空间约化。本节中，我们均使用 Hartree 原子单位，$\hbar = m_e = e = 4\pi\varepsilon_0 = 1$，因此能量以 Hartree E_h为单位，长度以玻尔半径 a_0为单位，时间 τ 以 $\hbar/E_h$为单位。在由 n 实正交空间轨道$\{\phi_p\}$构成的基组中，无场电子哈密顿量为 [50, 51]

$$H_0 = E_{\mathrm{nuc}} + \sum_{pq\sigma} h_{pq}\, f^\dagger_{p\sigma} f_{q\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{pqrs}\sum_{\sigma\tau} (pq|rs)\, f^\dagger_{p\sigma} f^\dagger_{r\tau} f_{s\tau} f_{q\sigma}, \tag{56}$$

其中，$f^\dagger_{p\sigma}$ 在轨道ϕ_p中产生一个自旋为 $\sigma \in \{\uparrow,\downarrow\}$ 的电子；h_{pq}为单电子积分（动能和核吸引），$(pq|rs)$为电子间排斥积分，而 E_{nuc} 为核间排斥。

我们模拟的可观测量是总偶极矩的 z 分量，其原点位于 Li 原子核，

$$\hat{\mu}_z = Z_{\mathrm{H}} R - \sum_{pq\sigma} z_{pq}\, f^\dagger_{p\sigma} f_{q\sigma}, \qquad z_{pq} = \langle\phi_p|z|\phi_q\rangle, \tag{57}$$

采用 $Z_{\mathrm{H}} = 1$。所有积分均使用 PySCF [52, 53] 在四种大小递增的高斯基组中计算：STO-3G [54, 55]，6-31G [56–58]，6-31G* [59],和 cc-pVDZ [60, 61]。它们分别给出 $n = 6$ 至$n = 19$ 个空间轨道，即最多 38 个费米子模式，见表 I。

对于初态 $|\Phi_F\rangle$，我们选择分子在 F 沿 z方向的静态均匀电场中的限制性 Hartree–Fock（RHF）Slater 行列式，即下式的 RHF 解

$$H_F = H_0 - F\hat{\mu}_z \tag{58}$$

在长度规范下，利用有限场方法获得 [62]，其中 $F = 0.02$ 原子单位。

在 $\tau = 0$ 场被关闭后，态在无场哈密顿量下演化

$$|\psi(\tau)\rangle = e^{-\mathrm{i}H_0\tau}\,|\Phi_F\rangle\,. \tag{59}$$

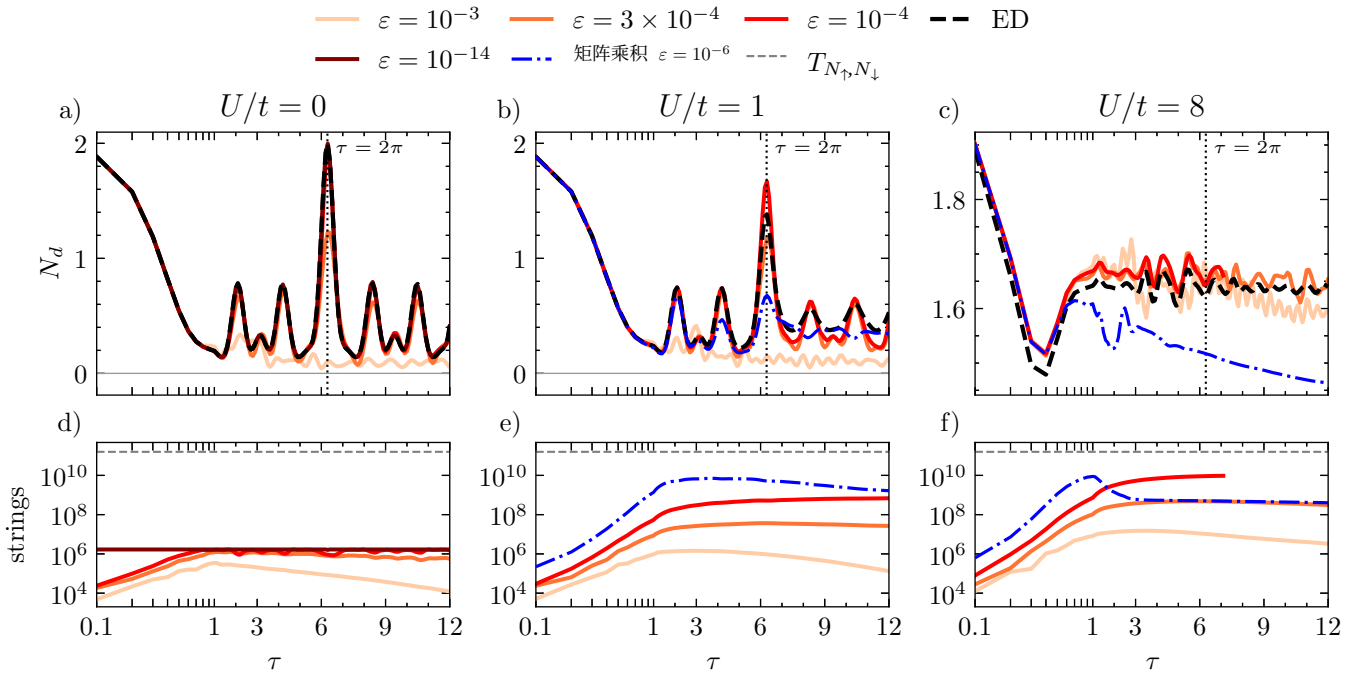

图 2. 在 6×6 晶格相邻格点上放置 $D = 2$ 个双占据后进行淬火，并在不同相互作用强度下依据费米-哈伯德动力学演化时，双占据的数量。(a) 在自由费米子情形下与精确对角化进行比较，$U/t = 0$，并包括使用 $\varepsilon = 10^{-14}$的模拟。(b)-(c) 在相互作用区间中，分别针对 $U/t = 1$ (b) 和 $U/t = 8$ (c)，与精确对角化和矩阵乘积进行比较。

我们模拟偶极矩的弛豫，

$$\langle \mu_z \rangle(\tau) = \langle \psi(\tau) | \hat{\mu}_z | \psi(\tau) \rangle \tag{60}$$

直到 $\tau_{\max} = 30$ 原子单位。对制备好的电子态进行这样的无场传播，是实时电子结构方法的标准检验手段 [13, 63]。由于单个行列式不是相互作用哈密顿量的本征态，动力学同时包含场诱导极化的弛豫和关联驱动的电子运动，参见文献 [64]。

我们用场极化 RHF 解的正则轨道来表示 H_0 和 $\hat{\mu}_z$。在这个基组中，初态是一个单一的福克态

$$|\Phi_F\rangle = f^\dagger_{1\uparrow} f^\dagger_{1\downarrow} f^\dagger_{2\uparrow} f^\dagger_{2\downarrow} |0\rangle,$$

场仅通过轨道的选择进入动力学：传播哈密顿量 H_0 不包含场项。表I 还报告了 $|\Phi_F\rangle$ 与 $|\phi_0\rangle$ 的精确基态 H_0 之间的重叠平方，其对所有轨道集合均超过 0。94。因此，淬火是对基态的微弱扰动，预计偶极矩将弛豫至其基态值$\langle \phi_0 | \hat{\mu}_z | \phi_0 \rangle$，正如图4所示。

为了将 $e^{-iH_0\delta\tau}$ 编译为使用费米子门的 Trotter 分解，我们对各项的幅值施加截断：考虑截断哈密顿量 $\tilde{H}_0$，其中保留场极化 RHF 解中幅值高于某一阈值的各项 $\lambda = 5 \times 10^{-3}$。随后，我们为$\tilde{H}_0$构造二阶 Trotter 分解（44），其参数为 $\delta\tau = 0.1$。表I 报告了所用各轨道基组在每个 Trotter 步中的项数。基于双体项的低秩表示（例如双重因子分解（DF）[65–68] 或张量超收缩（THC）[69, 70]，还可以对 $e^{-iH_0\delta\tau}$进行更高效的编译。本文的目标仅是说明狄拉克传播（DP）可作为分子动力学的模拟工具；对于经 DF 或 THC 编译的量子线路的 DP 模拟，我们留待未来研究。

我们使用带有系数截断 $\varepsilon = 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}$ 和权重截断$N_{\uparrow,\downarrow} = 2$的狄拉克传播来模拟动力学。图 4 展示了不同轨道集合的结果。我们将狄拉克传播的结果与 $\exp(-i\tau H_0)$ 和 $\exp(-i\tau \tilde{H}_0)$ 的精确对角化结果进行比较。我们观察到，$\varepsilon = 10^{-4}, 10^{-5}$ 在所有时刻都遵循 $\tilde{H}_0$ 的精确解，而 $\varepsilon = 10^{-3}$ 给出的预测则完全错误。这与 λ 和系数截断之间的相互作用有关：根据分裂规则 (24)，新字符串以 $\sin(\theta) \approx \theta = h\delta\tau$ 的阶生成，其中 h 是哈密顿量中对应项的系数。因此，对于许多项，我们有 $|h|\delta\tau < \varepsilon$，这意味着这些项一经生成就会被截断。$\tilde{H}_0$ 和 H_0 的动力学差异也很明显。减小 λ 可以恢复完整哈密顿量的精确动力学，但代价是门数量大幅增加。我们还观察到，每次模拟的字符串数量都会稳定在某个值，略低于

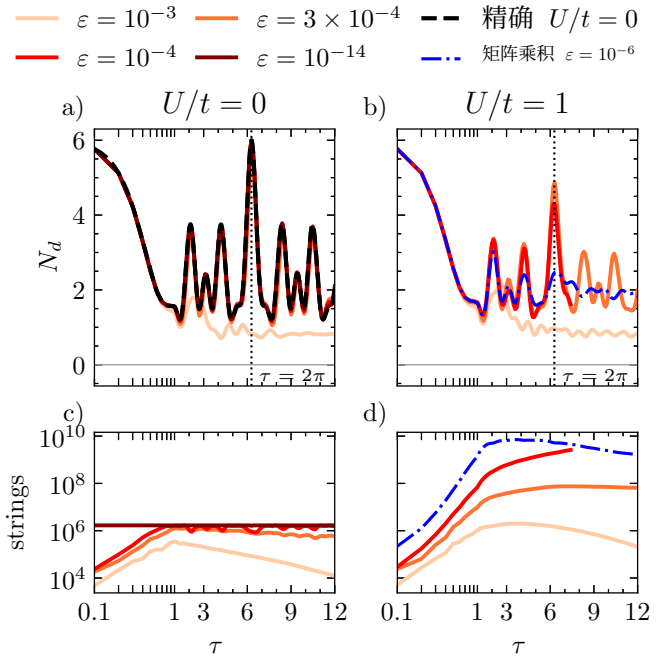

图 3. 对置于 6×6 晶格相邻位点上的 $D = 6$ 个双占据进行淬火后，在不同相互作用强度下，费米-哈伯德动力学中的双占据数量。(a) 在自由费米子情形下，与 $U/t = 0$处的精确对角化结果进行比较，其中包括使用 $\varepsilon = 10^{-14}$的模拟。(b) 在 $U/t = 1$处的相互作用区间内，与矩阵乘积结果进行比较。

上界（46）。

V. 结论

我们提出了狄拉克传播，这是一种海森堡绘景下的经典方法，用于计算在粒子数守恒幺正算符作用下演化的 N粒子态的期望值。该方法依赖于狄拉克串的精确演化，并采用系统性的截断策略来缓解字符串数量的增长。我们证明，截断权重高于目标粒子扇区的字符串不会给期望值引入误差。因此，狄拉克传播不会发生从高权重到低权重的回流，而其他海森堡绘景方法（如投影传播或矩阵乘积）则因算符回流而难以提供理论上的精度保证。不存在回流意味着，只需多项式数量的字符串即可计算精确期望值。此外，只要所关注的可观测量是局域（低权重）可观测量，狄拉克传播也是粒子数守恒高斯动力学的精确模拟器。

我们将 DP 应用于两个不同的相互作用费米子系统：（i）二维费米-哈伯德模拟，我们对一个简单的初态进行多次淬火，将其从自由费米子动力学推进至强相互作用区域。得益于其高效的缩放特性，在数-项数方面的高效标度使我们能够比其他海森堡绘景方法更准确地探测较长时间尺度内的动力学，并通过数值计算观察到一个完整周期后的精确态复现（这与自由费米子的解析计算预测一致），并讨论这一效应在相互作用区间中的存续情况。此外，（ii）我们利用狄拉克传播在固定 N 下有利的多项式标度，模拟分子波函数的淬火。这里，我们考察 LiH 分子的偶极矩，并计算在多个基组中进行淬火时的期望值，基组中的轨道数逐渐增加。这些结果共同表明，狄拉克传播能够对粒子数守恒演化下的局域费米子可观测量期望值进行可控、系统的经典估算。

DP 的结构为未来研究提供了多个方向。在量子化学中，可以将其对高斯轨道旋转和密度–密度相互作用的处理，与低秩哈密顿量分解和粒子–空穴表示相结合，从而进一步降低计算成本。在变分场景中，使用 DP 模拟候选的数目守恒量子线路，有望改进经典态制备算法。其他机会还包括将其应用于关联初态和热初态、计算动力学关联函数，以及混合 Schr¨odinger–Heisenberg 模拟策略。DP 的权重单调性使得较低权重扇区可以独立于较高权重扇区进行模拟。在实践中，可以从最低权重扇区开始，依次模拟各个权重扇区，从而缓解传播方法的内存瓶颈。除费米子系统之外，这些基本思想还可启发针对其他数目守恒模型的新型算符传播方案，包括以 $S_{\pm}$ 算符表述的自旋系统和少激发玻色子系统。最后，DP 为经典模拟和基准测试新兴费米子量子模拟器提供了一个颇具前景的框架。

致谢

APS感谢瑞士国家科学基金会通过资助项目TMPFP2 234085提供支持。

人工智能使用声明

作者感谢使用生成式人工智能工具（Claude、ChatGPT）来实现代码、验证主要结果并开展文献综述。作者已审阅、核实并修订所有人工智能辅助生成的内容，并对本研究的内容承担全部责任。

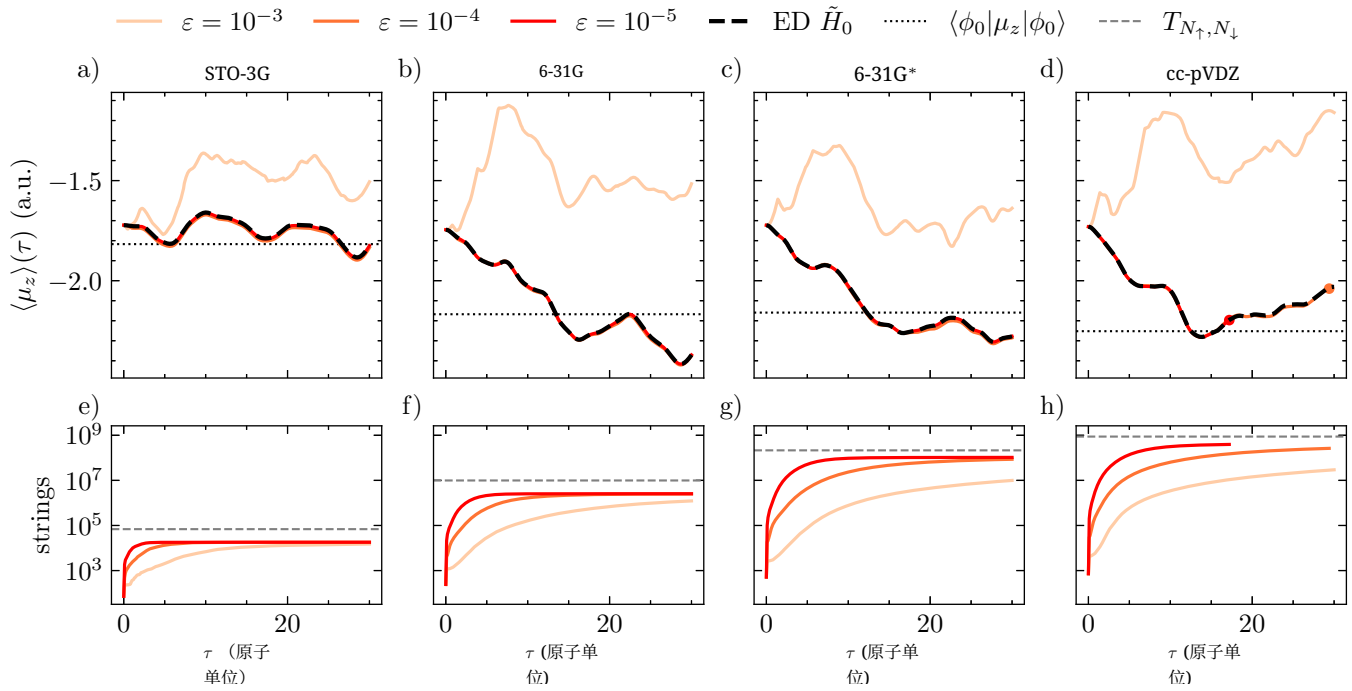

图4. 场极化哈密顿量的 HF 基态在零场哈密顿量下演化时的偶极矩期望值 μ_z。(a)–(d) 不同轨道基组和不同 DP系数截断 τ 下偶极矩随 $\varepsilon = 10^{-3}$、10^{-4}、10^{-5}变化。我们还对两个自旋扇区中的权重进行截断，$N_{\uparrow,\downarrow} = 2$。我们将 DP模拟与用于构建二阶 Trotter 分解的截断哈密顿量的 ED模拟进行比较 $\tilde{H}_0$，其中 $\delta\tau = 0.1$。点线标示精确基态中的偶极矩 $\langle\phi_0|\hat{}\mu_z|\phi_0\rangle$，该基态属于 $|\phi_0\rangle$。H_0。(e)–(h) 各模拟中的字符串数量。我们观察到，在所有设置下，字符串数量最终都趋于恒定，总字符串数量饱和于上界（46）。

附录 A：粒子数守恒演化下的权重不变性

式（12）中定义的狄拉克权重，可以理解为狄拉克展开产生非平凡作用所需的最小粒子数。为说明这一点，我们先证明如下结论。

引理 1. 权重为 $w(G) = k$ 的守数狄拉克展开 $G \neq 0$会湮灭 $\mathcal{F}_r$ 中的每个态，只要$r < k$，即

$$G|\psi\rangle = 0, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{F}_r, \tag{A1}$$

其中 $r < k$。

证明。根据定义1，规范字符串的权重 w 定义为湮灭算符的数量。考虑规范字符串 $\eta(v)$，其中 $w(v) = k$。将所有湮灭算符移至右侧只会产生一个符号，因为每一对交换的算符都属于不同模式。所得的 k 个湮灭算符的乘积会湮灭粒子数少于 k 的每个态。现在考虑权重为 $G = \sum_{v|c_v\neq 0} c_v\eta(v$的狄拉克展开 $k = w(G)$。根据狄拉克展开权重的定义2 ，可知 G 会湮灭$\mathcal{F}_r$ 中的所有态，只要 $r < k$。

□

由此得到以下引理。

引理 2. 对于一个守数狄拉克展开$G \neq 0$,

$$w(G) = \min\{r \mid \exists\, |\psi\rangle \in \mathcal{F}_r \ such\ that\ G|\psi\rangle \neq 0\}. \tag{A2}$$

证明。令 $k = w(G)$。根据引理 1， G 在每个$\mathcal{F}_r$ 上都为零，其中 $r < k$。还需证明 G 在 $\mathcal{F}_k$上作用非平凡。

权重大于 k 的字符串（可能出现在 G中的）在 $\mathcal{F}_k$ 上根据引理 1均为零。对于 k 权重的字符串$\eta(v)$，若它属于 G，令 I 为其湮灭指标集合，并令 J 为其产生指标集合。记 $|I\rangle$ 和 $|J\rangle$ 为恰好占据这些模式的占据态。由于 $|I| = k$， k粒子占据态中， $\eta(v)$ 唯一能非平凡作用的态是 $|I\rangle$，并且

$$\eta(v)|I\rangle = \pm|J\rangle. \tag{A3}$$

因此，限制在 $\mathcal{F}_k$ 上时，该字符串的作用为 $\pm|J\rangle\langle I|$。不同的规范字符串对应不同的指标对 (I, J)，因此分别对不同的矩阵元作出贡献。由于至少有一个权重为 k 的系数非零，这些贡献不可能全部相互抵消。因此， G 在 $\mathcal{F}_k$ 上作用非平凡。

□

命题 1 （权重不变性）。考虑一个守粒子数的狄拉克展开 G。对于任意守粒子数的幺正算符 U

$$w(U^\dagger GU) = w(G). \tag{A4}$$

证明。当 $G = 0$ 时，该结论显然成立。令 $k = w(G)$，其中 $G \neq 0$。由引理 1， G会湮灭$\mathcal{F}_r$ 中的每个态，其中 $r < k$。由于 U 保持每个粒子数子空间不变，因此当 $U|\psi\rangle \in \mathcal{F}_r$ 时， $|\psi\rangle \in \mathcal{F}_r$。因此

$$U^\dagger GU|\psi\rangle = 0 \qquad \text{for every } |\psi\rangle \in \mathcal{F}_r, \quad r < k. \tag{A5}$$

根据引理2，存在一个态 $|\psi\rangle \in \mathcal{F}_k$ 满足 $G|\psi\rangle \neq 0$。定义 $|\phi\rangle = U^\dagger|\psi\rangle \in \mathcal{F}_k$。那么

$$U^\dagger GU|\phi\rangle = U^\dagger G|\psi\rangle \neq 0, \tag{A6}$$

因为幺正算符会将非零向量映射为非零向量。因此，我们找到了一个态 $|\phi\rangle \in \mathcal{F}_k$，在该态上 $U^\dagger GU$ 的作用非平凡。这表明 $U^\dagger GU$ 作用非平凡的最小粒子数恰好为 k，从而证明了这一结论。

□

我们注意到，这一证明扩展了 [40],的研究结果；该研究表明，狄拉克-克利福德变换不能改变狄拉克串的权重。

1. 不同的费米子种类

在模拟 s 动力学过程中，如果各费米子种类都分别在动力学作用下保持不变，则引理1、2 可分别应用于每一种类。

引理 3。 一个权重为 j 的守数狄拉克展开 $G \neq 0$ $w_j(G) = k$ 会湮灭$\mathcal{F}_{N_1,\cdots,N_j,\cdots,N_s}$ 中的每一个态，其中 $N_j < k$，即：

$$G|\psi\rangle = 0, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{F}_{N_1,\cdots,N_j,\cdots,N_s}, \tag{A7}$$

其中 $N_j < k$。

证明。引理 3 的证明 1可由引理 $w \to w_j$直接推出。

□

引理 4。 对于一个守数狄拉克展开$G \neq 0$,

$$w_j(G) = \min\{r \mid \exists\, |\psi\rangle \in \mathcal{M}_r^{(j)} : G|\psi\rangle \neq 0\}, \tag{A8}$$

对于 $\mathcal{M}_r^{(j)}$，将福克空间限制在以下态：其中 r 个粒子属于种类 j，而所有其他种类的粒子数不受限制，

$$\mathcal{M}_r^{(j)} = \bigoplus_{N_1=0}^{M_1} \cdots \bigoplus_{N_{j-1}=0}^{M_{j-1}} \bigoplus_{N_{j+1}=0}^{M_{j+1}} \cdots \bigoplus_{N_s=0}^{M_s} \mathcal{F}_{N_1,\cdots,r,\cdots,N_s} \tag{A9}$$

证明。令 $k_j = w_j(G)$。根据引理 3 可得

$$G|\psi\rangle = 0 \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{M}_{r<k_j}^{(j)}. \tag{A10}$$

G 中权重高于 k_j 的字符串将在$\mathcal{M}_{k_j}^{(j)}$ 上消失。因此，我们必须证明， j权重为 k_j的字符串在 $\mathcal{M}_{k_j}^{(j)}$ 上非平凡地作用。

对于字符串 η（v），其 j权重为 k_j，令 I_j 为其在种类 J_j 的模式上的湮灭指标集合，并令 j为其产生指标集合。记 $|I_j;\ K\rangle$ 以及 $|J_j;\ K\rangle$ 为恰好占据这些种类模式、且其他所有种类的模式占据情况由j 指定的占据态。根据构造和定义（A9），有 $K;\ |I_j,\ K\rangle;\ |J_j$。无论费米子种类和模式的排序如何，我们都可以写成

$$\eta(v)=\sigma\prod_{l=1}^{s}\eta(v_l) \tag{A11}$$

对于 $\sigma=\pm1$ 重新排序符号以及仅包含种类 l 中存在于 v的模式的狄拉克串。我们还可以交换 $\eta(v_j)$ 的顺序，但这可能需要引入重新排序符号，因此有

$$\eta(v)\,|I_j;K\rangle=\pm\sigma\prod_{\substack{l=1\\l\neq j}}^{s}\eta(v_l)\,|J_j;K\rangle\,. \tag{A12}$$

对于任意种类，都可以重复这一过程，因此存在一个 K，使得

$$\prod_{\substack{l=1\\l\neq j}}^{s}\eta(v_l)\,|J_j;K\rangle\neq0. \tag{A13}$$

□

由于引理 3 和 4 成立，我们可以表述命题 1的逐种类版本：

命题 2 (单个费米子种类的权重不变性)。 考虑一个守数狄拉克展开 G 以及一个对所有费米子种类 $j=1$、$\cdots$、s均守数的幺正算符 U。那么对于$j=1$、$\cdots$、s，有

$$w_j(U^\dagger GU)=w_j(G). \tag{A14}$$

证明。令 $j=1,\ \cdots,\ s$。令 $k_j=w_j(G)$。根据引理 3 任意态 $|\psi\rangle\in\mathcal{M}^{(j)}_{r<k_j}$ 都会被 G湮灭。由于 U 保持所有不同的种类不变，对于 $|\psi\rangle\in\mathcal{F}_{N_1,\ \cdots,\ r,\ \cdots,\ N_s}$我们也有 $U|\psi\rangle\in\mathcal{F}_{N_1,\ \cdots,\ r,\ \cdots,\ N_s}$，这也意味着$|\psi\rangle\in\mathcal{M}^{(j)}_r$，$U|\psi\rangle\in\mathcal{M}^{(j)}_r$。因此，对于这类满足$r<k_j$

$$U^\dagger GU\,|\psi\rangle=0. \tag{A15}$$

设 $|\psi\rangle\in\mathcal{M}^{(j)}_{k_j}$ 是满足 $G|\psi\rangle\neq0$ (引理4) 的态。定义

$$|\phi\rangle=U^\dagger|\psi\rangle\in\mathcal{M}^{(j)}_{k_j}. \tag{A16}$$

Then

$$U^\dagger GU\,|\phi\rangle=U^\dagger G\,|\psi\rangle\neq0, \tag{A17}$$

这证明了 $U^\dagger GU$ 在 $\mathcal{M}^{(j)}_{k_j}$ 上具有非平凡作用，因此（A14）得证。

□

2. 权重不变性与时间反演 **al**

权重单调性引出了关于时间反演对称性的问题：例如，如果字符串的权重总是不减，那么先施加幺正算符 U 再施加 $U^\dagger$，为何能够还原原算符?

在泡利传播和马约拉纳传播中，当相乘的两个字符串在某些位置重合时，权重会降低，因为泡利算符和马约拉纳算符的平方等于单位算符，例如 $\sigma_x^2=1$。而对于狄拉克串，我们有 $f^2=0$。如（26）所示，这一性质会使分裂规则中的某些字符串变为 0 并被移除。

但仅凭这一点还不够，下面的例子最能说明恢复时间反演的另一种机制。考虑将跃迁算符（$i<k$按典范排序） $f_i^\dagger f_k-f_if_k^\dagger$通过密度-密度相互作用 $U_{nn}=\exp(-\mathrm{i}\theta n_in_j)$ 传播。利用（25），可得

$$\begin{aligned}U_{nn}^\dagger(f_i^\dagger f_k-f_if_k^\dagger)U_{nn}=f_i^\dagger f_k+(e^{\mathrm{i}\theta}-1)f_i^\dagger n_jf_k\\-f_if_k^\dagger-(e^{-\mathrm{i}\theta}-1)f_in_jf_k^\dagger\end{aligned} \tag{A18}$$

并应用逆演化 $\exp(+\mathrm{i}\theta n_in_j)$，得到

$$\begin{aligned}&f_i^\dagger f_k-f_if_k^\dagger=U_{nn}U_{nn}^\dagger(f_i^\dagger f_k-f_if_k^\dagger)U_{nn}U_{nn}^\dagger\\&=U_{nn}(f_i^\dagger f_k+(e^{\mathrm{i}\theta}-1)f_i^\dagger n_jf_k\quad-f_if_k^\dagger-(e^{-\mathrm{i}\theta}-1)f_in_jf_k^\dagger)U_{nn}^\dagger\\&=(f_i^\dagger+(e^{-\mathrm{i}\theta}-1)f_i^\dagger n_j)f_k+(e^{\mathrm{i}\theta}-1)(f_i^\dagger+(e^{-\mathrm{i}\theta}-1)f_i^\dagger n_j)n_jf_k-(f_i+(e^{\mathrm{i}\theta}-1)f_in_j)f_k^\dagger-(e^{-\mathrm{i}\theta}-1)(f_i+(e^{\mathrm{i}\theta}-1)f_in_j)n_jf_k^\dagger\\&=f_i^\dagger f_k+(e^{-\mathrm{i}\theta}-1+e^{\mathrm{i}\theta}-1+(e^{-\mathrm{i}\theta}-1)(e^{\mathrm{i}\theta}-1))f_i^\dagger n_jf_k-f_if_k^\dagger-(e^{\mathrm{i}\theta}-1+e^{-\mathrm{i}\theta}-1+(e^{\mathrm{i}\theta}-1)(e^{-\mathrm{i}\theta}-1))f_in_jf_k^\dagger\\&=f_i^\dagger f_k-f_if_k^\dagger.\end{aligned} \tag{A19}$$

因此我们看到，所有新生成的项都被以下算符消除精确抵消（在本例中，通过 $e^{\mathrm{i}\theta}-1+e^{-\mathrm{i}\theta}-1+$

$(e^{i\theta}-1)(e^{-i\theta}-1)=0$），唯一保留下来的项是原始跃迁项。

附录 B：扩展方法

1. 乘法

考虑两个狄拉克串 $\eta(u)$ 和 $\eta(v)$，

$$\eta(u)=\prod_{k=1}^{M}(f_k^\dagger)^{u_{2k-1}}(f_k)^{u_{2k}}, \tag{B1}$$

$$\eta(v)=\prod_{k=1}^{M}(f_k^\dagger)^{v_{2k-1}}(f_k)^{v_{2k}}. \tag{B2}$$

这两个字符串的乘法按以下步骤计算：

1. 重新排序：首先，我们必须对两个字符串中的模式重新排序，使它们彼此相邻。

$$\eta(u)\eta(v)=(-1)^{v^T\omega_U u}\prod_{k=1}^{M}(f_k^\dagger)^{u_{2k-1}}(f_k)^{u_{2k}}(f_k^\dagger)^{v_{2k-1}}(f_k)^{v_{2k}} \tag{B3}$$

其中 $\omega_U=\delta_{\lfloor j/2\rfloor>\lfloor i/2\rfloor}$ 是一个 $2M\times 2M$ 上三角矩阵（$\lfloor\cdot\rfloor$ 是向下取整函数）

$$\omega_U=\begin{pmatrix}0&0&1&1&1&1&\cdots&1&1\\0&0&1&1&1&1&\cdots&1&1\\0&0&0&0&1&1&\cdots&1&1\\0&0&0&0&1&1&\cdots&1&1\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots\\0&0&0&0&0&0&\cdots&1&1\\0&0&0&0&0&0&\cdots&1&1\\0&0&0&0&0&0&\cdots&0&0\\0&0&0&0&0&0&\cdots&0&0\end{pmatrix} \tag{B4}$$

2. 收缩和空穴模式标记：回顾（6）中的多重乘法表，我们现在将其转换为针对每个模式的逐索引规则

(u_{2k-1},u_{2k}) \ (v_{2k-1},v_{2k})	00 ($\mathbb{I}$)	01 (f)	10 ($f^\dagger$)	11 (n)
00 ($\mathbb{I}$)	00	01	10	11
01 (f)	01	×	$00-11$	01
10 ($f^\dagger$)	10	11	×	×
11 (n)	11	×	10	11

(B5)

定义辅助位串 $z\in\{0,1\}^{2M}$，用于描述模式收缩过程。再定义指标集 I，用于存储公共模式，即

$$I=\{k:(u_{2k-1}|u_{2k})=(v_{2k-1}|v_{2k})\} \tag{B6}$$

其中，$|$ 表示位“或”运算。对于 $k\notin I$，位收缩存储在 z 中，形式如下：

$$z_{2k-1}=u_{2k-1}\oplus v_{2k-1}\quad z_{2k}=u_{2k}\oplus v_{2k}. \tag{B7}$$

现在，我们依次遍历每个公共模式 $k\in I$ 并计算收缩。我们区分以下三种不同情况

- 删除：如果在任意时刻，$u_{2k-1}u_{2k}^c v_{2k-1}+u_{2k}v_{2k-1}^c v_{2k}=1$，其中 $x^c\equiv 1-x$ 表示位补，

$$\eta(u)\eta(v)=0 \tag{B8}$$

- 空穴标记：我们还必须标记产生空穴模式 $ff^\dagger$的模式。我们将这些模式存储在指标集 F中。这意味着

$$F=\{k\in I:u_{2k-1}^c u_{2k}v_{2k-1}v_{2k}^c=1\} \tag{B9}$$

- 其他情况：对于所有其他情况，所得的位收缩可以安全地存储在辅助字符串 z中，

$$z_{2k-1}=u_{2k-1}+u_{2k}^c v_{2k-1}\quad z_{2k}=u_{2k}v_{2k-1}^c+v_{2k} \tag{B10}$$

3. 转换为规范字符串基：最后一步，我们使用空穴模式标记 F将 $ff^\dagger$转换为 $\mathbb{I}-f^\dagger f$。

$$\eta(u)\eta(v)=(-1)^{v^T\omega_U u}\prod_{k\in F^c}(f_k^\dagger)^{z_{2k-1}}(f_k)^{z_{2k}}\prod_{k\in F}(\mathbb{I}-f_k^\dagger f_k) \tag{B11}$$

其中 $F^c=[M]\backslash F$。因此，两个狄拉克串相乘会得到一个包含 $2^{|F|}$ 个字符串的狄拉克展开。

2. 厄米共轭

我们定义指标集 L，用于记录狄拉克串 $\eta(v)$ 中的未配对模，即

$$L=\{k:v_{2k-1}\oplus v_{2k}=1\}. \tag{B12}$$

对于典范狄拉克串的厄米共轭，我们得到

$$\eta(v)^\dagger=(-1)^{|L|(|L|-1)/2}\eta(v^{\rm hc}), \tag{B13}$$

其中，$v^{\rm hc}$ 是通过在每个模式处交换两个比特而从 v 得到的二进制向量，

$$(v^{\rm hc})_{2k-1}=v_{2k},\qquad (v^{\rm hc})_{2k}=v_{2k-1}. \tag{B14}$$

这种比特交换体现了 $f_k\leftrightarrow f_k^\dagger$。例如，若$v=1001$，则 $\eta(v)=f_1^\dagger f_2$且

$$(f_1^\dagger f_2)^\dagger=\eta(1001)^\dagger=-\eta(0110)=-f_1 f_2^\dagger. \tag{B15}$$

两个比特对在局部交换，而对未配对模进行重新排序会产生负号。厄米共轭将权重变为 $w(v^{\rm hc})=\sum_k v_{2k-1}$。因此，它保留守数字符串的权重，但不一定保留一般字符串的权重。

3. 正规排序

虽然上述二进制表示对于计算和实现狄拉克传播很有用，但我们还希望将字符串改写为标准的正规排序形式，这种形式更适合理论分析。令I、J、$K \subseteq [M]$为互不相交的指标集。我们定义

$$\mathbf{f}_I^\dagger = f_{i_1}^\dagger \cdots f_{i_q}^\dagger, \tag{B16}$$

$$\mathbf{f}_J = f_{j_q} \cdots f_{j_1} \tag{B17}$$

$$\mathbf{n}_K = n_{k_1} \ldots n_{k_r} \tag{B18}$$

$$\mathbf{n}_K \mathbf{f}_I^\dagger \mathbf{f}_J = n_{k_1} \ldots n_{k_r} f_{i_1}^\dagger \cdots f_{i_q}^\dagger f_{j_q} \cdots f_{j_1}, \tag{B19}$$

其中 $(i_1 < \ldots < i_q \in I)$、$(j_1 < \ldots < j_q \in J)$ 和 $(k_1 < \ldots < k_r \in K)$。因此，密度算符和产生算符按模式指标递增的顺序排列，而湮灭算符则按模式指标递减的顺序排列。请注意，由于我们考虑的是粒子数守恒算符，因此取 $|I| = |J|$。对于相同的占据模，典范排序与正规排序之间仅相差一个符号。可以证明

$$\mathbf{n}_K \mathbf{f}_A^\dagger \mathbf{f}_B = (-1)^{v_B^T \omega_U v_A + \frac{|B|(|B|-1)}{2}} \eta(v) \tag{B20}$$

其中

$$A = \{k : v_{2k-1} = 1, v_{2k} = 0\} \tag{B21}$$

$$B = \{k : v_{2k-1} = 0, v_{2k} = 1\} \tag{B22}$$

$$K = \{k : v_{2k-1} = 1, v_{2k} = 1\} \tag{B23}$$

$$v_A = \text{Dirac string associated with } \mathbf{f}_A^\dagger \tag{B24}$$

$$v_B = \text{Dirac string associated with } \mathbf{f}_B \tag{B25}$$

我们选择这种表示，是因为它便于推导算符的希尔伯特–施密特内积。可以证明 [71]

$$\langle \mathbf{n}_K \mathbf{f}_A^\dagger \mathbf{f}_B \,|\, \mathbf{n}_L \mathbf{f}_C^\dagger \mathbf{f}_D \rangle_{HS} = \mathrm{Tr}\Big(\mathbf{f}_B^\dagger \mathbf{f}_A \mathbf{n}_K \mathbf{n}_L \mathbf{f}_C^\dagger \mathbf{f}_D \Big) \tag{B26}$$

$$= \delta_{A,C} \delta_{B,D} 2^{M - |A \cup B \cup L \cup K|}. \tag{B27}$$

这些表达式可通过以下计数论证得到。对于非零内积，我们得到 $A = C$ 和 $B = D$，因为其他情况与任何福克态的重叠都为零。此外，要使重叠非零，A占据的格点必须为空，而 $(B \cup L \cup K)$ 占据的格点必须填有费米子。还可以证明

$$\mathrm{Tr}_N(\mathbf{f}_B^\dagger \mathbf{f}_A \mathbf{n}_K \mathbf{n}_L \mathbf{f}_C^\dagger \mathbf{f}_D) = \delta_{A,C} \delta_{B,D} \binom{M - |A \cup B \cup L \cup K|}{N - |B \cup L \cup K|} \tag{B28}$$

公式（B27）指向一种基于未配对算符的直和结构（即 A 和 B 在 $\mathbf{n}_K \mathbf{f}_A^\dagger \mathbf{f}_B$中）。

我们给出几个示例来说明这一点。考虑一个单格点系统。平衡字符串的空间由 $\{\mathbb{I}, f_1^\dagger f_1\}$张成。如果我们为这样的基构造一个内积矩阵（格拉姆矩阵），则得到如下结果

$$G = \begin{array}{c} \\ \mathbb{I} \\ f_1^\dagger f_1 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \mathbb{I} & f_1^\dagger f_1 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \tag{B29}$$

考虑一个双站点系统。平衡字符串的空间由 $\{\mathbb{I}, f_1^\dagger f_1, f_2^\dagger f_2, f_1^\dagger f_1 f_2^\dagger f_2, f_1^\dagger f_2, f_2^\dagger f_1\}$张成。

$$G = \begin{array}{c} \\ \mathbb{I} \\ f_1^\dagger f_1 \\ f_2^\dagger f_2 \\ f_1^\dagger f_1 f_2^\dagger f_2 \\ f_1^\dagger f_2 \\ f_2^\dagger f_1 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} \mathbb{I} & f_1^\dagger f_1 & f_2^\dagger f_2 & f_1^\dagger f_1 f_2^\dagger f_2 & f_1^\dagger f_2 & f_2^\dagger f_1 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \tag{B30}$$

实际上，$G = G_0 \oplus G_{f_1^\dagger f_2} \oplus G_{f_2^\dagger f_1}$。进一步注意，矩阵 G_0、$G_{f_1^\dagger f_2}$、$G_{f_2^\dagger f_1}$具有相同的结构，

$$G_0 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{\otimes 2} \tag{B31}$$

$$G_{f_1^\dagger f_2} = G_{f_2^\dagger f_1} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{\otimes 0} \tag{B32}$$

现在我们可以将其扩展到任意数量的站点。给定M个站点，平衡字符串的格拉姆矩阵 G为

$$G = \bigoplus_{\substack{A,B \subseteq [M] \\ A \cap B = \emptyset}} G_{\mathbf{f}_A^\dagger \mathbf{f}_B} \tag{B33}$$

其中

$$G_{\mathbf{f}_A^\dagger \mathbf{f}_B} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{\otimes (M - 2|A|)} \tag{B34}$$

在每个块内，我们移除（$A \cup B$）个站点，并按站点索引递增以及权重递增的顺序排列行索引和列索引。现在，我们已经能够以高效方式构造正规排序下的格拉姆矩阵，因此可以通过简单的标签匹配，在典范排序下找到格拉姆矩阵的系数（符号不会发挥作用）。

我们还可以求出两个狄拉克展开之间的内积。设 $R = \sum_u c_u \eta(u)$ 和 $S = \sum_v d_v \eta(v)$ 为两个狄拉克展开。R 和S 之间的内积为

$$\langle R \,|\, S \rangle_{HS} = \sum_{u,v} c_u^* d_v \,\mathrm{Tr}\big(\eta(u)^\dagger \eta(v)\big) \tag{B35}$$

$$= \sum_{u,v} c_u^* d_v G_{uv}. \tag{B36}$$

4. 空穴基

回想一下，我们将 $\mathcal{D}_1$ 称为局域典范狄拉克算符基

$$\mathcal{D}_1 = \{\mathbb{I}, f, f^\dagger, n = f^\dagger f\}. \tag{B37}$$

同样有效的局部基选择可以是

$$\mathcal{D}_1^h = \{\mathbb{I}, f, f^\dagger, h = f f^\dagger\} \tag{B38}$$

我们将其称为空穴局部基。现在可以将空穴狄拉克串定义为

$$\eta^h(v) = (f_1)^{v_1}(f_1^\dagger)^{v_2}\cdots(f_M)^{v_{2M-1}}(f_M^\dagger)^{v_{2M}}, \tag{B39}$$

由 $2M$ 比特字符串 $v \in \{0,1\}^{2M}$ 编索引。这使我们能够描述空穴算符基

$$\mathcal{D}_M^h = \{\eta^h(v) : v \in \{0,1\}^{2M}\}. \tag{B40}$$

类似地，我们也可以将空穴狄拉克展开定义为 $\mathcal{D}_M^h$ 中元素的线性组合。此外，由于我们将范围限制在粒子数守恒系统的情形，对应算符空间的基为

$$\mathcal{B}_M^h = \left\{\eta^h(v) \in \mathcal{D}_M^h : \sum_{k=1}^M v_{2k-1} = \sum_{k=1}^M v_{2k}\right\}. \tag{B41}$$

在这一限制下，湮灭算符的数量与产生算符的数量始终相等，因此无需定义不同的权重表达式。顺便提及，权重单调性的证明也与所选基无关。然而，我们现在改变权重截断的规则。如果初态最多有$\ell = (M-N)$ 个空穴，我们可以安全地截断具有$w(v) > \ell$ 的字符串，因为任何包含多于 ℓ 个产生算符的字符串与初态的重叠都将为 0。因此，在 ℓ 较小的高填充区间内，空穴基中的截断方案优于标准基。由于我们在空穴基中选择的比特映射，乘法过程也不受换基影响。基于这些观察，对于 $N \le M/2$ 我们始终使用标准基，对于$N > M/2$则使用空穴基。因此，在粒子数守恒模拟中，项数受限于（32）中给出的项缩放关系。

附录 C：表达式

本节给出典范狄拉克串 $U^\dagger\eta(v)U$ 在若干生成元作用下的行为表达式。我们首先描述其对单个产生与湮灭算符的作用，然后利用 $\eta(v)$ 将其推广至一般字符串

$$U^\dagger\eta(v)U = \prod_{k=1}^M \left(U^\dagger f_k^\dagger U\right)^{v_{2k-1}} \left(U^\dagger f_k U\right)^{v_{2k}}. \tag{C1}$$

展开乘积后，利用费米子重新排序符号和局部乘法表，将每一项恢复为规范的模式顺序。

一般的分裂规则由（24）给出，我们在此重述。我们有

$$\begin{aligned} U_\pm^\dagger\eta(v)U_\pm = \eta(v) &+ \mathrm{i}\frac{\sin(\sqrt{\kappa}\theta)}{\sqrt{\kappa}}[G_\pm, \eta(v)] \\ &+ \frac{\cos(\sqrt{\kappa}\theta)-1}{\kappa}[G_\pm, [G_\pm, \eta(v)]], \end{aligned} \tag{C2}$$

其中，对于 $\eta(g) \in \mathcal{B}_M$，我们引入了

$$G_+(g) \equiv \eta(g) + \eta(g)^\dagger \tag{C3}$$

$$G_-(g) \equiv -\mathrm{i}(\eta(g) - \eta(g)^\dagger), \tag{C4}$$

以及 $U_\pm = e^{-\mathrm{i}\theta G_\pm(g)}$。为从哈达玛级数（20）推导出分裂规则，我们需要

$$\mathrm{ad}_{G_\pm}^3\left(\eta(v)\right) = \kappa\ \mathrm{ad}_{G_\pm}\left(\eta(v)\right), \qquad \kappa \in \{1,4\}. \tag{C5}$$

此外，κ 的值由以下公式确定

$$\kappa = 1, \text{ if } G_\pm[\eta(v), G_\pm]G_\pm = 0, \tag{C6}$$

$$\kappa = 4, \text{ if } G_\pm[\eta(v), G_\pm]G_\pm = -[\eta(v), G_\pm]. \tag{C7}$$

下面给出一些较常见费米子项的单模分裂规则的具体结果。

1. 跃迁生成元

我们考虑一个跃迁项

$$H_{ij} = f_i^\dagger f_j + f_j^\dagger f_i, \qquad U_{ij}(\theta) = e^{-\mathrm{i}\theta H_{ij}}. \tag{C8}$$

产生算符上的海森堡作用为

$$U_{ij}^\dagger f_k^\dagger U_{ij} = \begin{cases} \cos\theta\, f_i^\dagger + \mathrm{i}\sin\theta\, f_j^\dagger, & k = i, \\ \cos\theta\, f_j^\dagger + \mathrm{i}\sin\theta\, f_i^\dagger, & k = j, \\ f_k^\dagger, & k \notin \{i,j\}. \end{cases} \tag{C9}$$

对易子为

$$[H_{ij}, f_k^\dagger] = [f_i^\dagger f_j, f_k^\dagger] + [f_j^\dagger f_i, f_k^\dagger]. \tag{C10}$$

我们先考虑 $k \notin \{i,j\}$。有

$$[f_i^\dagger f_j, f_k^\dagger] = 0, \tag{C11}$$

而对于 $k = j$

$$[f_i^\dagger f_j, f_j^\dagger] = f_i^\dagger, \tag{C12}$$

对于 $k = i$ 也同样如此。综上，

$$[H_{ij}, f_k^\dagger] = \begin{cases} f_j^\dagger & k = i \\ f_i^\dagger & k = j \\ 0 & k \notin \{i,j\} \end{cases} \tag{C13}$$

由此可得（C9）。

2. 密度生成元

考虑一个密度生成元

$$H_i = n_i = f_i^\dagger f_i, \qquad U_i(\theta) = e^{-\mathrm{i}\theta H_i}. \tag{C14}$$

于是我们得到

$$U_i^\dagger f_k^\dagger U_i = \begin{cases} e^{\mathrm{i}\theta} f_i^\dagger, & k = i, \\ f_k^\dagger, & k \neq i. \end{cases} \tag{C15}$$

3. 密度-密度生成元

对于作用于两个不同模式i 和 j上的密度-密度生成元，令

$$H_{ij} = n_i n_j, \qquad U_{ij}(\theta) = e^{-\mathrm{i}\theta H_{ij}}. \tag{C16}$$

产生算符的海森堡作用为

$$U_{ij}^\dagger f_k^\dagger U_{ij} = \begin{cases} f_i^\dagger + \left(e^{\mathrm{i}\theta} - 1\right) f_i^\dagger n_j, & k = i, \\ f_j^\dagger + \left(e^{\mathrm{i}\theta} - 1\right) f_j^\dagger n_i, & k = j, \\ f_k^\dagger, & k \notin \{i, j\}. \end{cases} \tag{C17}$$

4. 双激发生成元

现在考虑四个两两不同的模式 p、q、r、s之间的双激发过程。定义

$$A_{pqrs} = f_p^\dagger f_q^\dagger f_r f_s \tag{C18}$$

$$H_{pqrs} = A_{pqrs} + A_{pqrs}^\dagger \tag{C19}$$

其对应的幺正算符为 $U_{pqrs}(\theta) = e^{-\mathrm{i}\theta H_{pqrs}}$。为简洁起见，定义占据投影算符

$$\begin{aligned} Q_p &= n_q(\mathbb{I} - n_r)(\mathbb{I} - n_s) + (\mathbb{I} - n_q) n_r n_s, \\ Q_q &= n_p(\mathbb{I} - n_r)(\mathbb{I} - n_s) + (\mathbb{I} - n_p) n_r n_s, \\ Q_r &= n_s(\mathbb{I} - n_q)(\mathbb{I} - n_p) + (\mathbb{I} - n_s) n_q n_p, \\ Q_s &= n_r(\mathbb{I} - n_q)(\mathbb{I} - n_p) + (\mathbb{I} - n_r) n_q n_p. \end{aligned} \tag{C20}$$

产生算符的非平凡海森堡作用为

$$\begin{aligned} U_{pqrs}^\dagger f_k^\dagger U_{pqrs} = f_k^\dagger &+ \mathrm{i}\sin\theta \left(\delta_{kp} f_s^\dagger f_r^\dagger f_q - \delta_{kq} f_s^\dagger f_r^\dagger f_p\right) \\ &+ \mathrm{i}\sin\theta \left(-\delta_{kr} f_p^\dagger f_q^\dagger f_s + \delta_{ks} f_p^\dagger f_q^\dagger f_r\right) \\ &+ (\cos\theta - 1) f_k^\dagger \left(\delta_{kp} Q_p + \delta_{kq} Q_q\right) \\ &+ (\cos\theta - 1) f_k^\dagger \left(\delta_{kr} Q_r + \delta_{ks} Q_s\right). \end{aligned} \tag{C21}$$

5. 密度辅助跃迁生成元

密度辅助跃迁源于含有一个重复指标的四费米子项。对于三个不同模式i，j，ℓ，定义 $U_{ij|\ell}(\theta) = e^{-\mathrm{i}\theta H_{ij|\ell}}$，其中

$$H_{ij|\ell} = n_\ell \left(f_i^\dagger f_j + f_j^\dagger f_i\right) = n_\ell H_{ij}. \tag{C22}$$

由于 n_ℓ 是一个投影算符，且与 H_{ij}对易，因此该幺正算符可以改写为

$$U_{ij|\ell}(\theta) = (\mathbb{I} - n_\ell) + n_\ell e^{-\mathrm{i}\theta H_{ij}}. \tag{C23}$$

因此，只有当模式ℓ被占据时，i 与 j 之间才会发生跃迁。于是我们得到

$$U_{ij|\ell}^\dagger f_k^\dagger U_{ij|\ell} = \begin{cases} f_i^\dagger + (\cos\theta - 1) f_i^\dagger n_\ell + \mathrm{i}\sin\theta\, f_j^\dagger n_\ell, & k = i, \\ f_j^\dagger + (\cos\theta - 1) f_j^\dagger n_\ell + \mathrm{i}\sin\theta\, f_i^\dagger n_\ell, & k = j, \\ f_\ell^\dagger e^{\mathrm{i}\theta H_{ij}}, & k = \ell, \\ f_k^\dagger, & k \notin \{i, j, \ell\}. \end{cases} \tag{C24}$$

$k = \ell$ 情形中出现的指数项可以明确写为

$$e^{\mathrm{i}\theta H_{ij}} = \mathbb{I} + \mathrm{i}\sin\theta\, H_{ij} + (\cos\theta - 1)\left(n_i + n_j - 2 n_i n_j\right), \tag{C25}$$

其中我们使用了

$$H_{ij}^2 = n_i + n_j - 2 n_i n_j. \tag{C26}$$

附录 D：截断误差

在狄拉克传播中，应用一个幺正通道后，狄拉克展开会被截断。借鉴投影传播中关于可观测量误差界的现有研究 [29]，我们证明，狄拉克传播中同样成立类似的界。给定一个初始 N粒子态 ρ_0 和一个初始可观测量 O，考虑应用幺正通道序列 $\mathcal{C} = \mathcal{C}_L \circ \mathcal{C}_{L-1} \circ \ldots \circ \mathcal{C}_1$。可观测量 O 和初态 ρ_0 的期望值为

$$\langle O \rangle = \mathrm{Tr}(O\mathcal{C}(\rho_0)) \tag{D1}$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\mathcal{C}^\dagger(O)\rho_0\right). \tag{D2}$$

实际操作中，我们在应用每个通道后截断各项，并将应用第 j 个通道后得到的新截断可观测量记为 O_{L-j}。因此，截断后的各项为

$$\mathcal{C}_{L-j+1}^\dagger(O_{L-j+1}) - O_{L-j} = \sum_v d_{j,v}\eta(v) \tag{D3}$$

其中 $O_L \equiv O$。需要注意的是，系数截断和权重截断均保持厄米性，因此（D3）中的截断狄拉克展开同样是厄米的。

正如正文所指出的，对高于粒子扇区的权重进行权重截断不会在期望值中引入误差。仅由系数截断导致的第（$L-j$）层期望值误差为

$$\Delta_{L-j} = |\mathrm{Tr}_N[(\mathcal{C}^\dagger_{L-j+1}(O_{L-j+1}) - O_{L-j})\rho_{L-j}]| \quad \text{(D4)}$$

其中 $\rho_{L-j} = \mathcal{C}_{L-j} \circ \ldots \circ \mathcal{C}_1(\rho_0)$。利用（D3），

$$\begin{aligned}\Delta_{L-j} &= \left|\sum_v \mathrm{Tr}_N(d_{j,v}\eta(v)\rho_{L-j})\right| \\ &= \left|\sum_v \frac{1}{2}\mathrm{Tr}_N((d_{j,v}\eta(v) + d^*_{j,v}\eta(v)^\dagger)\rho_{L-j})\right| \\ &\leq \sum_{\substack{v:\\ \text{unpaired}\\ \text{strings}}} \frac{1}{2}\left(|\mathrm{Re}(d_{j,v})| + |\mathrm{Im}(d_{j,v})|\right) + \sum_{\substack{v:\\ \text{paired}\\ \text{strings}}} |d_{j,v}|\end{aligned} \quad \text{(D5)}$$

其中我们在（D5）中使用了三角不等式。我们还使用了

$$\mathrm{Tr}_N((\eta(v) + \eta(v)^\dagger)\rho_{L-j}) \leq 1 \quad \text{(D6)}$$

$$\mathrm{Tr}_N(\mathrm{i}(\eta(v) - \eta(v)^\dagger)\rho_{L-j}) \leq 1, \quad \text{(D7)}$$

因为未配对狄拉克弦的厄米和的本征值为 ± 1。对于完全配对的狄拉克弦，必须单独考虑其论证，因为我们得到$\eta(v) = \eta(v)^\dagger$。

如果改用柯西–施瓦茨不等式，我们得到

$$\begin{aligned}\Delta^2_{L-j} &= \mathrm{Tr}_N((\mathcal{C}^\dagger_{L-j+1}(O_{L-j+1}) - O_{L-j})\rho_{L-j})^2 \\ &\leq ||\mathcal{C}^\dagger_{L-j+1}(O_{L-j+1}) - O_{L-j}||^2_F \,\mathrm{Tr}_N(\rho^2_{L-j}).\end{aligned} \quad \text{(D8)}$$

由于 ρ_{L-j}是一个纯 N粒子态，$\mathrm{Tr}_N(\rho^2_{L-j}) = 1$。因此，

$$\Delta_{L-j} \leq ||\mathcal{C}^\dagger_{L-j+1}(O_{L-j+1}) - O_{L-j}||_F. \quad \text{(D9)}$$

利用狄拉克展开的内积表达式，我们得到

$$||\mathcal{C}^\dagger_{L-j+1}(O_{L-j+1}) - O_{L-j}||_F = \sqrt{\sum_{u,v} G_{uv} d^*_{j,u} d_{j,v}}. \quad \text{(D10)}$$

总误差 Δ 可以通过在每一层迭代并使用三角不等式来界定，

$$\Delta \leq \sum_{l=0}^{L-1} \Delta_l, \quad \text{(D11)}$$

使用（D5）或（D9）。与用于计算期望值的三角不等式（D5）相比，柯西–施瓦茨界（D9）更宽松。然而，对于算符重叠，柯西–施瓦茨界更紧。

[1] L. V. Keldysh，《非平衡过程的图示技术》，苏联物理学 JETP **20**，1018（1965年）。[2] H. Aoki、N. Tsuji、M. Eckstein、M. Kollar、T. Oka 和 P. Werner，《非平衡动力学平均场理论及其应用》，Rev. Mod. Phys. **86**，779（2014年）。[3] B. Bauer、S. Bravyi、M. Motta 和 G. K.-L. Chan，《量子化学与量子材料科学的量子算法》，《化学评论》**120**，12685（2020年）。[4] C. W. Bauer、Z. Davoudi、A. B. Balantekin、T. Bhattacharya、M. Carena、W. A. de Jong、P. Draper、A. El-Khadra、N. Gemelke、M. Hanada、D. Kharzeev、H. Lamm、Y.-Y. Li、J. Liu、M. D. Lukin、Y. Meurice、C. Monroe、B. Nachman、G. Pagano、J. Preskill、E. Rinaldi、A. Roggero、D. I. Santiago、M. J. Savage、I. Siddiqi、G. Siopsis、D. Van Zanten、N. Wiebe、Y. Yamauchi、K. Yeter-Aydeniz 和 S. Zorzetti，《高能物理的量子模拟》，PRXQuantum **4**，027001（2023年）。[5] D. S. Abrams 和 S. Lloyd，《通用量子计算机上的多体费米系统模拟》，Phys. Rev. Lett. **79**，2586（1997年）。[6] I. D. Kivlichan、J. McClean、N. Wiebe、C. Gidney、A. Aspuru-Guzik、G. K.-L. Chan 和 R. Babbush，《具有线性深度和连通性的电子结构量子模拟》，Phys. Rev. Lett. **120**，110501（2018年）。

[7] D. Rocca、C. L. Cortes、J. F. Gonthier、P. J. Ollitrault、R. M. Parrish、G.-L. Anselmetti、M. Degroote、N. Moll、R. Santagati 和 M. Streif，通过对称性压缩双重因式分解缩短化学容错量子模拟的运行时间，J. Chem. Theory Comput. **20**，4639（2024）。[8] J. Lee、D. W. Berry、C. Gidney、W. J. Huggins、J. R. Mc- Clean、N. Wiebe 和 R. Babbush，通过张量超收缩进一步提高化学量子计算的效率，PRX Quantum **2**，030305（2021）。[9] A. Polkovnikov、K. Sengupta、A. Silva 和 M. Vengalat- tore，专题讨论：封闭相互作用量子系统的非平衡动力学，Rev. Mod. Phys. **83**，863（2011）。[10] M. Eckstein、M. Kollar 和 P. Werner，哈伯德模型中相互作用淬火后的热化，Phys. Rev. Lett. **103**，056403（2009）。[11] M. Rigol、V. Dunjko 和 M. Olshanii，一般孤立量子系统的热化及其机制，Nature **452**，854（2008）。[12] M. Moeckel 和 S. Kehrein，哈伯德模型中从绝热到突发相互作用淬火的转变：预热化与非平衡动力学，New J. Phys. **12**，055016（2010）。[13] X. Li、N. Govind、C. Isborn、A. E. DePrince, III 和

K. Lopata，实时含时电子结构理论，《化学评论》120，9951（2020）。[14] E. Runge 和 E. K. U. Gross，含时系统的密度泛函理论，Phys. Rev. Lett. 52，997（1984年）。[15] A. Bruner、S. Hernandez、F. Mauger、P. M. Abanador、D. J. LaMaster、M. B. Gaarde、K. J. Schafer 和 K. Lopata，基于定义明确的初态，利用含时密度泛函理论模拟阿秒电荷迁移的精确动力学，J. Phys. Chem. Lett. 8，3991（2017年）。[16] A. Kirilyuk、A. V. Kimel 和 T. Rasing，磁序的超快光学操控，Rev. Mod. Phys. 82，2731 2010( )。[17] E. Beaurepaire、J.-C. Merle、A. Daunois 和 J.-Y. Bigot，铁磁性镍中的超快自旋动力学，Phys. Rev. Lett. 76，4250（1996年）。[18] W.-T. Peng、B. S. Fales 和 B. G. Levine，利用含时完全活性空间组态相互作用模拟复杂分子的电子动力学，J. Chem. Theory Comput. 14，4129（2018年）。[19] A. Baiardi，利用含时密度矩阵重整化群研究电子动力学，J. Chem. Theory Comput. 17，3320（2021）。[20] X. Li、N. Govind、C. Isborn、A. E. DePrince, III 和 K. Lopata，实时含时电子结构理论，《化学评论》120，9951（2020）。[21] K. Yabana 和 G. F. Bertsch，实时含时局域密度近似，Physical Review B 54，4484（1996年）。[22] D. R. Nascimento 和 A. E. DePrince, III，基于显式含时运动方程耦合簇理论的线性吸收光谱，J. Chem. Theory Comput. 12，5834（2016年）。[23] S. Hirthe、T. Chalopin、D. Bourgund、P. Bojovi´c、A. Bohrdt、E. Demler、F. Grusdt、I. Bloch 和 T. A. Hilker，超冷原子费米子梯子系统中磁介导的空穴配对，《自然》613，463–467（2023年）。[24] D. Bourgund、T. Chalopin、P. Bojovi´c、H. Schl¨omer、S. Wang、T. Franz、S. Hirthe、A. Bohrdt、F. Grusdt、I. Bloch 和 T. A. Hilker，混合维度冷原子费米–哈伯德系统中单条纹的形成，《自然》637，57–62（2025年）。[25] M. Xu、L. H. Kendrick、A. Kale、Y. Gang、C. Feng、S. Zhang、A. W. Young、M. Lebrat 和 M. Greiner，低温环境下的中性原子哈伯德量子模拟器，《自然》642，909（2025年）。[26] P. Bojovi´c、T. Hilker、S. Wang、J. Obermeyer、M. Barendregt、D. Tell、T. Chalopin、P. M. Preiss、I. Bloch 和 T. Franz，费米原子的高保真碰撞量子门，《自然》652，602（2026年）。[27] P. Rall、D. Liang、J. Cook 和 W. Kretschmer，通过泡利传播模拟量子比特量子电路，P hysical Review A 99，062337（2019年）。[28] T. Begu˘si´c、J. Gray 和 G. K.-L. Chan，在容错实现之前，快速且收敛的经典模拟为量子计算的实用性提供证据，《科学进展》10，eadk4321（2024），https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/sciadv.adk432

1.

[29]M. S. Rudolph、T. Jones、Y. Teng、A. Angrisani 和 Z. Holmes，泡利传播：用于模拟量子系统的计算框架(2025年)，arXiv:2505.21606 [量子物理]。[30] T. Begu˘si´c 和 G. K.-L. Chan，通过稀疏泡利算符在二维和三维中进行实时算符演化动力学，《PRX Quantum》6，020302（2025）。[31] M. S. Rudolph、E. Fontana、Z. Holmes 和 L. Cincio，使用 lowesa 对量子系统进行经典代理模拟（2023），arXiv:2308.09109 [quant-ph]。[32] E. Fontana、M. S. Rudolph、R. Duncan、I. Rungger 和 C. Cˆırstoiu，有噪声变分量子线路的经典模拟，《npj Quantum Information》11，84 2025( )。[33] M. D'Anna、J. Nys 和 J. Carrasquilla，二维晶格费米子系统中非平衡动力学的马约拉纳弦模拟，《Physical Review B》114，034305（2026），arXiv:2511.02809 [cond-mat.quant- gas]。[34] A. Miller、J. Favre、Z. Holmes、 ¨O. Salehi、R. Chakraborty、A. Nyk¨anen、Z. Zimbor´as、A. Glos 和 G. Garc´ıa-P´erez，使用马约拉纳传播模拟费米子线路（2025），arXiv:2503.18939 [quant-ph]。[35] R. Chakraborty、A. Miller、A. Nyk¨anen、 ¨Ozlem Salehi、F. Tarocco、F. Pavo˘sevi´c、P. A. B. Haase、M. Stella 和 A. Glos，使用马约拉纳传播进行迭代基态近似的可扩展量子线路生成（2026），arXiv:2603.23444 [quant-ph]。[36] C. Shrikhande、A. Bachhar、J. A. Rodr´ıguez-Jim´enez、E. F. Valeev 和 N. J. Mayhall，泡利传播实现强关联量子系统的快速经典模拟，《PRX Quantum》7，043022（2026）。[37] C.-J. Lin、H. Gharibyan 和 V. P. Su，实用规模量子态制备：使用泡利路径模拟进行经典训练，《Quantum》10，2014（2026）。[38] F. Santona、M. G. Algaba、A. A. Anuar、A. M. Wernbacher、P. Sharma 和 F. ˘Simkovic I V，使用变分虚时间马约拉纳演化进行硬件高效的基态制备（2026），arXiv:2610.01954 [quant-ph]。[39] F. A. Evangelista 和 I. Magoulas，费米子算符的精确闭式幺正变换，《物理评论A辑》111，042825（2025）。[40] I. Magoulas 和 F. A. Evangelista，费米子量子系统的克利福德变换：从泡利算符和马约拉纳算符到狄拉克费米子，《Physical Review A》113，022455（2026），arXiv:2510.23923 [quant-ph]。[41] D. P. DiVincenzo 和 B. M. Terhal，重新审视费米子线性光学，《Found. Phys.》35，1967（2005）。[42] P. A. M. Dirac，发射与辐射吸收的量子理论，《Proc. Roy. Soc. Lond. A》114，243（1927）。[43] R.-J. Slager 和 G. Chaudhary，《理论物理学 II：量子理论专题》，剑桥大学，物理系（2024），附录 A，公式（A.2），哈达玛引理。[44]I. B˘rezinov´a、M. Stimpfle、S. Donsa 和 A. Rubio，弱相互作用费米-哈伯德模型中的动力学准凝聚，《Phys. Rev. B》109，174308（2024）。[45] M. D'Anna 和 M. S. Rudolph，MajoranaPropagation.jl（2026）。[46] G. Facelli、H. Fawzi 和 O. Fawzi，弱相互作用费米子中马约拉纳传播的快速收敛（2026），arXiv:2601.05226 [quant-ph]。[47] C. Zhao、I. Marvian 和 Y. Tong，弱相互作用费米子动力学的高效经典模拟（2026），arXiv:2608.19448 [quant-ph]。[48] A. Kandala、A. Mezzacapo、K. Temme、M. Takita、M. Brink、J. M. Chow 和 J. M. Gambetta，硬件

高效的变分量子本征求解器，用于小分子和量子磁体，《Nature》549，242（2017）。[49] C. Hempel、C. Maier、J. Romero、J. McClean、T. Monz、H. Shen、P. Jurcevic、B. P. Lanyon、P. Love、R. Babbush、A. Aspuru-Guzik、R. Blatt 和 C. F. Roos，囚禁离子量子模拟器上的量子化学计算，《物理评论X》8，031022（2018）。[50] A. Szabo 和 N. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*，《Dover化学丛书》（多佛出版社，1996年）。[51] T. Helgaker、P. Jørgensen 和 J. Olsen, *Molecular Electronic-Structure Theory* 2000 （

Wiley，奇切斯特，）。[52] Q. Sun、T. C. Berkelbach、N. S. Blunt、G. H. Booth、S. Guo、Z. Li、J. Liu、J. D. McClain、E. R. Sayfutyarova、S. Sharma、S. Wouters 和 G. K.-L. Chan，PySCF：基于Python的化学模拟框架，《WIREs Comput. Mol. Sci.》8，e1340（2018）。[53] Q. Sun、X. Zhang、S. Banerjee、P. Bao、M. Barbry、N. S. Blunt、N. A. Bogdanov、G. H. Booth、J. Chen、Z.-H. Cui、J. J. Eriksen、Y. Gao、S. Guo、J. Hermann、M. R. Hermes、K. Koh、P. Koval、S. Lehtola、Z. Li、J. Liu、N. Mardirossian、J. D. McClain、M. Motta、B. Mussard、H. Q. Pham、A. Pulkin、W. Purwanto、P. J. Robin- son、E. Ronca、E. R. Sayfutyarova、M. Scheurer、H. F. Schurkus、J. E. T. Smith、C. Sun、S.-N. Sun、S. Upad- hyay、L. K. Wagner、X. Wang、A. White、J. D. Whitfield、M. J. Williamson、S. Wouters、J. Yang、J. M. Yu、T. Zhu、T. C. Berkelbach、S. Sharma、A. Y. Sokolov 和 G. K.- L. Chan，PySCF程序包的最新发展，《J. Chem. Phys.》153，024109（2020）。[54] W. J. Hehre、R. F. Stewart 和 J. A. Pople，自洽分子轨道方法 I：使用斯莱特型原子轨道的高斯展开，《J. Chem. Phys.》51，2657（1969）。[55] W. J. Hehre、R. Ditchfield、R. F. Stewart 和 J. A. Pople，自洽分子轨道方法 IV：使用斯莱特型轨道的高斯展开——扩展至第二周期分子，《J. Chem. Phys.》52，2769（1970）。[56] R. Ditchfield、W. J. Hehre 和 J. A. Pople，自洽分子轨道方法 IX：用于有机分子分子轨道研究的扩展高斯型基组，《J. Chem. Phys.》54，724（1971）。[57] W. J. Hehre、R. Ditchfield 和 J. A. Pople，自洽分子轨道方法 XII：用于有机分子分子轨道研究的高斯型基组的进一步扩展，《J. Chem. Phys.》56，2257 1972( )。[58] J. D. Dill 和 J. A. Pople，自洽分子轨道方法 XV：用于

锂、铍和硼，《化学物理学杂志》62, 2921 (1975)。[59] P. C. Hariharan 和 J. A. Pople，极化函数对分子轨道氢化能的影响，《理论化学学报》28, 213 (1973)。[60] T. H. Dunning, Jr.，用于相关分子计算的高斯基组。I. 硼至氖原子和氢，《化学物理学杂志》90, 1007 (1989)。[61] B. P. Prascher、D. E. Woon、K. A. Peterson、T. H. Dunning, Jr. 和 A. K. Wilson，用于相关分子计算的高斯基组。VII. Li、Be、Na 和 Mg 的价层、芯价层及标量相对论基组，《理论化学会计》128, 69 (2011)。[62] H. D. Cohen 和 C. C. J. Roothaan，Hartree–Fock方法计算原子的电偶极极化率。I. 闭壳层系统的理论，《化学物理学杂志》43, S34 (1965)。[63] P. Krause、T. Klamroth 和 P. Saalfrank，激光脉冲驱动多电子动力学的含时组态相互作用计算：氰化锂中的受控偶极切换，《化学物理学杂志》123, 074105 (2005)。[64] L. S. Cederbaum 和 J. Zobeley，电子相关引发的超快电荷迁移，《化学物理快报》307, 205 (1999)。[65] E. G. Hohenstein、R. M. Parrish 和 T. J. Mart´ınez，张量超收缩密度拟合。I. 四次标度的二阶和三阶 Møller–Plesset 微扰理论，《化学物理学杂志》137, 044103 (2012)。[66] R. M. Parrish、E. G. Hohenstein、T. J. Mart´ınez 和 C. D. Sherrill，张量超收缩。II. 最小二乘重整化，《化学物理学杂志》137, 224106 2012( )。[67] Y. Matsuzawa 和 Y. Kurashige，面向低深度量子电路的量子化学 Jastrow 型分解，《化学理论与计算杂志》16, 944 (2020年)。[68] M. Motta、E. Ye、J. R. McClean、Z. Li、A. J. Minnich、R. Babbush 和 G. K.-L. Chan，用于电子结构量子模拟的低秩表示，npj Quantum Inf. 7, 83 (2021)。[69] J. Cohn、M. Motta 和 R. M. Parrish，利用压缩双重因子分解哈密顿量进行量子滤波对角化，PRX Quantum 2, 040352 (2021)。[70] O. Oumarou、M. Scheurer、R. M. Parrish、E. G. Hohenstein 和 C. Gogolin，通过正则化压缩双重因子分解加速量子化学计算，Quantum 8, 1371 (2024)。[71] V. Bach 和 R. Rauch，费米子 k 体算符的正交化与可表性，《物理评论A辑》99, 042109 2019( )。