

黎曼几何在双括号量子虚时演化中的作用

René Zander¹[0000-0003-0603-5637], Raphael Seidel¹[0000-0003-3560-9556], Li
Xiaoyue²[0009-0004-6879-1598], and Marek Gluza²[0000-0003-2836-9523]

¹ Fraunhofer Institute FOKUS, Berlin, Germany

{rene.zander, raphael.seidel}@fokus.fraunhofer.de

² School of Physical and Mathematical Sciences, Nanyang Technological University,

21 Nanyang Link, 637371 Singapore, Republic of Singapore

marekludwik.gluza@ntu.edu.sg

摘要 双括号量子虚时演化 (DB-QITE) 是一种量子算法, 它在能量代价函数的黎曼最速下降方向上连贯地执行步骤。DB-QITE 源于 Brockett 的双括号流, 在该流中梯度消失的地方存在鞍点。在这项工作中, 我们进行了 DB-QITE 的数值模拟, 并描述了通过这些鞍点附近区域过渡的特征。我们使用在 Qrisp 中编程的量子编译提供了明确的门计数分析。

Keywords: 量子计算 · 黎曼梯度 · 量子虚时演化 · 双括号量子算法。

1 介绍

量子计算在材料科学 [1] 或化学 [17] 中的应用可以通过逼近虚时间演化 (ITE) 来实现, 对于输入的量子态 $|\Psi_0\rangle$ 、持续时间 τ 和哈密顿量 $\hat{H}$ 定义为

$$|\Psi(\tau)\rangle = \frac{e^{-\tau\hat{H}}|\Psi_0\rangle}{\|e^{-\tau\hat{H}}|\Psi_0\rangle\|}. \quad (1)$$

对于 $\tau \rightarrow \infty$ ITE 接近于 $\hat{H}$ 的基态 $|\lambda_0\rangle$, 前提是 $\langle\Psi_0|\lambda_0\rangle \neq 0$ [7]。参见参考文献 [10] 以获取关于 τ 中收敛速率的界限。

最近, [10] 提出了一种名为 DB-QITE 的量子算法, 该算法基于 ITE 是一种双括号流 [10] 的事实。这种分析方法避开了由于测量误差 [11, 18, 20] 或后选择 [15] 而导致的先前方法的局限性。具体来说, 通过对公式 (1) 求导并考虑密度矩阵 $\Psi(\tau) = |\Psi(\tau)\rangle\langle\Psi(\tau)|$, 我们得到

$$\frac{\partial\Psi(\tau)}{\partial\tau} = [[\Psi(\tau), \hat{H}], \Psi(\tau)]. \quad (2)$$

这个矩阵值常微分方程是已广泛研究的 Brockett 的双括号流 (DBF) 的一个实例 [13]。众所周知, ITE 是一个梯度流 [12], 这可以视为 Brockett 的 DBFs 也是梯度流这一事实的推论 [3, 6, 14, 19, 22, 23, 25], 关于这一点, 请参见深入专著 [13]。接下来, 我们将介绍黎曼几何的基本概念, 并确定那些能够让我们评估几何对 DB-QITE 量子算法运行影响的数量。然后我们将通过数值模拟明确地计算它们。

2 黎曼梯度在 ITE 中的作用

我们现在讨论方程 (2) 中的 ITE 动力学如何通过黎曼流形上的梯度下降来最小化能量。首先, 让我们精确地定义手头的具体流形概念。参考文献 [13], 我们考虑伴随酉流形 $\mathcal{M}(A) = \{UAU^\dagger \text{ s.t. } U^{-1} = U^\dagger\}$, 它是通过一个么正算子 U 演化出的厄米算符 A 的所有矩阵集合。换句话说, $\mathcal{M}(A)$ 作为从么正矩阵流形 $\mathcal{U}(d) = \{U \in \mathbb{C}^{d \times d} \text{ s.t. } U^{-1} = U^\dagger\}$ 映射出来的结果出现。其他关于量子计算的工作考虑了 $\mathcal{U}(d)$ 作为基底流形 [26], 但类似的梯度算子出现, 并且黎曼梯度的形式可以转移到 ITE DBF 上。

接下来, 我们定义一个损失函数, 它将 $\mathcal{M}(A)$ 中的点映射到非负数。具体来说, 设 B 为一个 Hermitian 矩阵, 我们将把它称为目标矩阵。对于任何形式为 $P = UAU^\dagger$ 的 $P \in \mathcal{M}(A)$, 我们定义损失函数

$$\mathcal{L}_B(P) = -\frac{1}{2} \|P - B\|_{\text{HS}}^2. \quad (3)$$

然后, 在 P 处评估的黎曼梯度由 [13, 26] 给出

$$\text{grad}_P \mathcal{L}_B(P) = -[[P, B], P]. \quad (4)$$

随后, 我们将 $\mathcal{M}(A)$ 上的梯度流定义为从 $A(0) = A$ 在 $t = 0$ 开始延伸的点的一个平滑曲线 $A(t)$, 使得 $A(t)$ 是梯度流方程的唯一解

$$\partial A(t)/\partial t = -\text{grad}_{A(t)} \mathcal{L}_B(A(t)) = [[A(t), B], A(t)], \quad (5)$$

这是 Brockett 的 DBF 方程。

通过希尔伯特-施密特范数的么正不变性我们有 [13]

$$\partial_\tau \mathcal{L}(\tau) = -\|[A(\tau), B]\|_{\text{HS}}^2. \quad (6)$$

这将成本函数沿最速下降方向的动力学与梯度算子的括号大小联系起来。对于 ITE, 我们设置 $A = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|$ 和 $B = \hat{H}$ 使得 $A(\tau) = |\Psi(\tau)\rangle\langle\Psi(\tau)|$, 并且

成本函数由 $\mathcal{L}_{\hat{H}}(\Psi(\tau)) = -\frac{1}{2}\|\Psi(\tau) - \hat{H}\|_{\text{HS}}^2$ 给出。通过简单的代数运算，我们将其简化为

$$\mathcal{L}_{\hat{H}}(\Psi(\tau)) = E(\tau) - \frac{1}{2}(1 + \|\hat{H}\|_{\text{HS}}^2). \quad (7)$$

只有 ITE 能量 $E(\tau) = \langle \Psi(\tau) | \hat{H} | \Psi(\tau) \rangle$ 起作用，第二项对优化无关紧要。我们注意到，虽然单独来看，ITE 和 Brockett 的 DBF 都受到了广泛关注，但据我们所知，在参考文献 [10] 中建立的这一联系并不广为人知。

使用莱布尼茨法则和方程 (2)，我们发现能量变化为 [10]

$$\partial_\tau E(\tau) = -2V(\tau), \quad (8)$$

其中 $V(\tau) = \langle \Psi(\tau) | (\hat{H} - E(\tau))^2 | \Psi(\tau) \rangle$ 被称为能量波动。这一关系表明，状态中的更高能量波动会导致能量更快下降。我们有 $V(0) = 0$ 对于任意的本征态 $\hat{H}$ ，这些是 $|\Psi_0\rangle$ 的选择，其中 $E(\tau)$ 不会减少。参见 [13] 解释了 Brockett 的 DBF 的线性稳定性分析，并证明了除非我们有 $|\Psi_0\rangle = |\lambda_0\rangle$ ，否则这些平衡点是不稳定的鞍点。

3 DB-QITE 量子算法

DB-QITE 是在双括号量子算法框架下使用可实现于量子计算机上的么正操作对 ITE 数据库进行近似而制定的 [9]。具体来说，使用方程 (2) 我们得到

$$|\Psi(\tau)\rangle = e^{\tau[|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|, \hat{H}]} |\Psi_0\rangle + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (9)$$

并且这个么正算子可以用群换位子 (GC) 公式近似表示

$$G_s(\hat{A}, \hat{B}) = e^{i\sqrt{s}\hat{A}} e^{i\sqrt{s}\hat{B}} e^{-i\sqrt{s}\hat{A}} e^{-i\sqrt{s}\hat{B}} = e^{-s[\hat{A}, \hat{B}]} + \mathcal{O}(s^{3/2}). \quad (10)$$

参考文献 [10] 指出，群换位子中的最后一个么正算子有一个平凡作用 $e^{-i\sqrt{s}|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|} |\Psi_0\rangle = e^{i\sqrt{s}} |\Psi_0\rangle$ 这导致了定义

$$|\omega_{k+1}\rangle = e^{i\sqrt{s_k}\hat{H}} e^{i\sqrt{s_k}\omega_k} e^{-i\sqrt{s_k}\hat{H}} |\omega_k\rangle. \quad (11)$$

最后，令 U_k 表示从一个平凡的参考态 $|0\rangle$ 制备 $|\omega_k\rangle$ 的电路，即 $|\omega_k\rangle := U_k|0\rangle$ 。我们现在可以利用么正性来简化 $e^{i\sqrt{s_k}\omega_k} = U_k e^{i\sqrt{s_k}|0\rangle\langle 0|} U_k^\dagger$ 并获得 DB-QITE 电路合成的递推公式：

$$U_{k+1} = e^{i\sqrt{s_k}\hat{H}} U_k e^{i\sqrt{s_k}|0\rangle\langle 0|} U_k^\dagger e^{-i\sqrt{s_k}\hat{H}} U_k. \quad (12)$$

这里, U_0 可以是任何么正矩阵, 使得 $|\omega_0\rangle := U_0 |0\rangle$ 能够给出输入哈密顿量 $\hat{H}$ 的基态 $|\lambda_0\rangle$ 的有效近似。然而, 必须谨慎选择 U_0 , 因为 DB-QITE 的后续步骤将继续隐式地依赖于 U_0 。切线空间的解释表明, 对等式 (9) 的更好近似可能是有利的。

同样如 Ref. [21], 我们考虑更高阶乘法公式 (HOPF) 与 $\phi = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$

$$e^{i\phi\sqrt{s}\hat{A}}e^{i\phi\sqrt{s}\hat{B}}e^{-i\sqrt{s}\hat{A}}e^{-i(1+\phi)\sqrt{s}\hat{B}}e^{i(1-\phi)\sqrt{s}\hat{A}}e^{i\sqrt{s}\hat{B}} = e^{-s[\hat{A},\hat{B}]} + \mathcal{O}(s^2), \quad (13)$$

相比 GC, 它更准确但使用更多操作。这导致了 DB-QITE 的轻微推广

$$U_{k+1} = e^{i\phi\sqrt{s_k}\hat{H}}e^{i\phi\sqrt{s_k}\omega_k}e^{-i\sqrt{s_k}\hat{H}}e^{-i(1+\phi)\sqrt{s_k}\omega_k}e^{i(1-\phi)\sqrt{s_k}\hat{H}}U_k. \quad (14)$$

Ref. [10] 证明了 Eq. (12) 导致了一个类似于 Eq. (8) 的关系, 即能量 $E_k := \langle \omega_k | \hat{H} | \omega_k \rangle$ 和方差 $V_k := \langle \omega_k | \hat{H}^2 | \omega_k \rangle - E_k^2$ 之间的关系由

$$E_{k+1} \leq E_k - 2s_k V_k + \mathcal{O}(s_k^2). \quad (15)$$

给出。这是底层黎曼几何的直接结果, 我们将在下面评估这些量。

3.1 量子编译用于 DB-QITE

编译 DB-QITE 算法需要多种算法原语, 其适当协调从软件工程的角度来看具有挑战性。为了有效促进实现并模块化维护、调试和优化编译的每个组件, 我们使用了 Qrisp 编程框架 [24]。特别是, Qrisp 提供了一个自动内存管理系统, 这使得几个模块可以在不纠缠代码的情况下交换辅助量子比特, 从而便于对相对较大的系统进行 DB-QITE 模拟。Qrisp 的另一个优点是整个 DB-QITE 实现由图 1 中的代码给出。

与陈述进入所谓的量子环境, 它们代表高阶量子函数 [24]。我们现在将讨论在 Qrisp 中本机可用的编译原语。特别是, DB-QITE 么正 (12) 涉及两种类型的运算, 我们需要使用 Clifford + T + RZ 来表达每一种。第一种类型的操作是哈密顿演化 $e^{i\sqrt{s_k}\hat{H}}$, 可以通过 Trotter-Suzuki 分解 [5] 实现。在第 4 节中考虑的哈密顿量是两体的, 因此每个项都可

```
from qrisp import *

def QITE(qarg, U_0, exp_H, s, k):

    def conjugator(qarg):
        with invert():
            QITE(qarg, U_0, exp_H, s, k-1)

    def reflection(qarg, t):
        with conjugate(conjugator)(qarg):
            mcp(t, qarg, ctrl_state=0)

    if k==0:
        U_0(qarg)
    else:
        s_ = s[k-1]**0.5
        QITE(qarg, U_0, exp_H, s, k-1)
        with conjugate(exp_H)(qarg, s_):
            reflection(qarg, s_)
```

图 1. DB-QITE 的 Qrisp 实现。qarg 是被操作的量子变量, U_0 是一个状态准备函数, exp_H 是一个模拟所讨论哈密顿量的函数。s 是指示时间表的数组, k 是递归深度。

以用两个 CNOT 门、两个 RZ 门和一些单量子比特 Clifford 变换来模拟基变化 [27]。为了优化深度，我们将这些项分类为层。属于同一层的项不会作用在同一个量子比特上，因此可以并行执行。这种分类是通过启发式图着色算法 [16] 实现的。

第二类操作在等式 (12) 中是反射门 $e^{i\sqrt{s_k}|0\rangle\langle 0|}$ ，这些实际上是单量子比特相位门，受其余量子比特控制。Qrisp 原生提供了一种基于参考 [2] 的这些门的编译方法：我们将涉及的量子比特的“控制”状态计算到一个新分配的量子比特中，如果所有控制量子比特与给定的控制态一致，则将其设置为 $|1\rangle$ ，在这种情况下是 $|0\rangle$ 。随后，我们在辅助量子比特上执行单个相位门操作，在最后进行辅助量子比特的反计算。对于辅助量子比特的（反）计算，我们修改了参考 [2] 中给出的方法以使用 Gidney 的逻辑与 [8] 来计算中间结果。

整个程序具有在短期和长期都有效的良好扩展性：该程序需要³ $3.5n - 4$ 个纠缠门（当前这比较有挑战性）并且仅执行单个相位门（在大多数量子纠错码中成本很高）。当不进行中途线路测量编译时，如实验中所做的那样，该程序仍然具有 $6n - 6$ 个纠缠门的良好扩展性。虽然 Ref. [10] 证明了保真度与 DB-QITE 步骤数量 k 的指数收敛，方程 (12) 显示电路深度（即对哈密顿量模拟或反射的查询次数）也按 k 指数增长。接下来，我们将使用 Qrisp 模拟来澄清这种权衡。

4 DB-QITE 的数值示例

由于 DB-QITE 电路规模呈指数级扩展，只有少数递归步骤在实际中是可行的。为了探索在这种约束下所能达到的基态近似质量，我们在 Qrisp 编程框架中实现了一个完全可编译版本的 DB-QITE，将严谨的数学理论与应用驱动的量子模拟结合起来。

让我们考虑将 DB-QITE 应用于横向磁场海森堡模型

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^L (X_i X_{i+1} + Y_i Y_{i+1} + Z_i Z_{i+1}) + B \sum_{i=1}^L Z_i \quad (16)$$

³ 经典的控制 Z 门被触发 50% 次，并增加了 $0.5n$ 的运行时间。

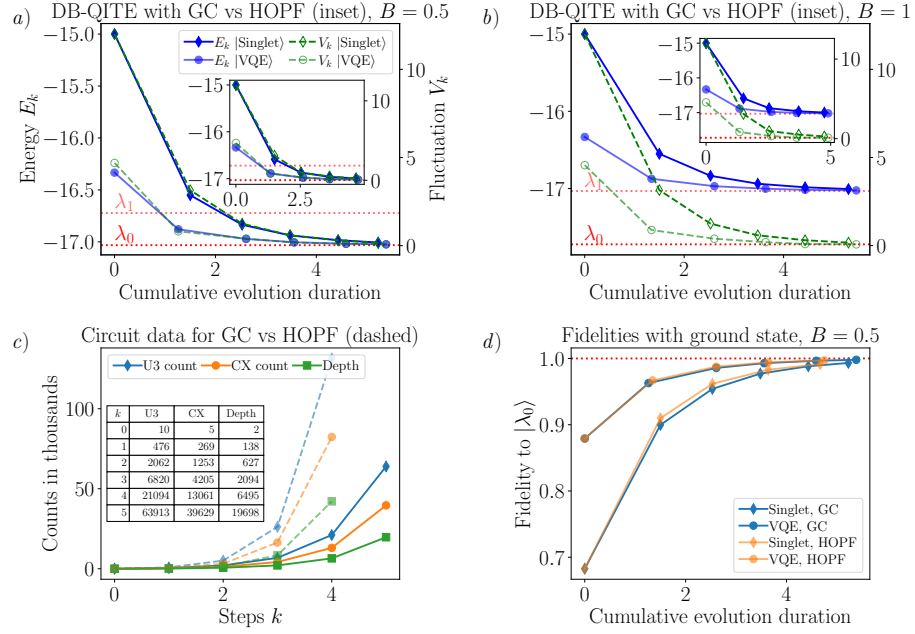


图 2. DB-QITE 对于 10 量子比特的海森堡模型。a) 当 $B = 0.5$, 则 $|\text{Singlet}\rangle$ 具有大的基态重叠 $\mathcal{F}_0(0) = 0.68$ 并且与第一激发态 $\mathcal{F}_1(0) = 0$ 没有重叠, 类似地, $|\text{VQE}\rangle$ 具有 $\mathcal{F}_0(0) = 0.88$ 和 $\mathcal{F}_1(0) = 0$ 。DB-QITE 快速收敛到基态。b) 对于 $B = 1$ 基态和第一激发态互换角色然后 $\mathcal{F}_0(0) = 0$, $\mathcal{F}_1(0) = 0.68$ 对于 $|\text{Singlet}\rangle$ 和 $\mathcal{F}_0(0) = 0$, $\mathcal{F}_1(0) = 0.88$ 对于 $|\text{VQE}\rangle$ 和 DB-QITE 收敛到 $|\lambda_1\rangle$ 。c) 门的计数 {U3, CX} 及面板 a) 的电路深度, 当使用 GC 和 HOPF 公式时对于 $|\text{Singlet}\rangle$ 。d) GC 和 HOPF 导致相似的保真度收敛。

其中 L 是量子比特的数量, B 被解释为磁场强度。对于数值模拟, 我们设置 $L = 10$ 、 $J = 1$ 和 $B \in \{0.5, 1\}$ 。哈密顿量模拟, 即么正 $e^{i\tau H}$, 是通过二阶泰勒公式用 2 步实现的。在每个 DB-QITE 步骤中, 我们使用一个 20 点网格搜索来找到产生最佳能量增益的 s_k 。此外, 方程 (10) 具有近似不变性 $G_{\alpha\beta s}(\hat{A}/\alpha, \hat{B}/\beta) = e^{-s[\hat{A}, \hat{B}]} + \mathcal{O}(s^{3/2})$, 但通过 α, β 重新缩放可以影响在 $\mathcal{O}(s^{3/2})$ [9] 中的逼近常数。我们实证发现, 通过启发式设定 $\alpha = 10, \beta = 1$, 能够找到 s_k , 这提供了更好的基态近似值。

4.1 比较 DB-QITE 与 GC 和 HOPF

图 2 比较了 DB-QITE 与 GC 和 HOPF 在能量下降、能量波动、门计数和基态保真度方面的性能。初始状态是通过 *i*) 单重态的张量积 $|\text{Singlet}\rangle = 2^{-L/4}(|10\rangle - |01\rangle)^{\otimes L/2}$ 构建连续量子比特, 并且 *ii*) 使用一个包含一层问题特定近似的 VQE 预热启动 [4]。我们可以得出的结论是, 尽管 HOPF 和 GC 具有相似的轨迹并且都能达到相同的保真度水平 (收敛到基态在 *a*) 和第一激发态在 *b*)), 但 HOPF 需要显著更多的门。因此, 在一般情况下虽然 HOPF 可能有助于更好的梯度近似, 但在这种情况下不需要它, 简单的 GC 公式就足够了。

4.2 预处理瓶颈

图 3 的上部面板说明了本征态作为 ITE DBF 鞍点所起的作用。当初始状态非常接近本征态 $|\Psi_0\rangle \approx |\lambda_k\rangle$ 时, 可能会出现阻碍达到基态 $|\lambda_0\rangle$ 的情况。然而, 我们发现, 对于远离本征态 $|\lambda_k\rangle$ 的初始化, 有可能通过本征态附近过渡。具体来说, 我们考虑方程 (16) 的本征态, 并且对于 $k = 1, 2, 4$ 设定为 $|\Psi_0^{(k)}\rangle = (|\lambda_{10}\rangle + \frac{1}{2}|\lambda_k\rangle + \sqrt{F_0}|\lambda_0\rangle)/\sqrt{1.25 + F_0}$ 与 $F_0 = 10^{-6}$ 。第 k 个本征态对初始向量有贡献, 但并不占主导地位, 也就是说对于 $\tau = 0$, 我们有 $|\Psi_0^{(k)}\rangle \approx 0.9|\lambda_{10}\rangle + 0.45|\lambda_k\rangle$ 和初始能量 $E(0) \approx (\lambda_{10} + \frac{1}{4}\lambda_k)/1.25$ 。在 ITE 下, 两个分量都呈指数级抑制, 但对于手头的能量尺度, 我们发现经过公式 (1) 中的归一化后, $|\lambda_{10}\rangle$ 的贡献几乎可以忽略不计, 即对于 $\tau \approx 2$, ITE 状态 $|\Psi^{(k)}(\tau)\rangle \approx |\lambda_k\rangle$ 几乎是一个本征态, 这一点通过方差评估得到了证明。随着 τ 增加, 这一波函数成分最终被抑制得比基态成分更快, 我们发现 $|\Psi^{(k)}(\tau \rightarrow \infty)\rangle \rightarrow |\lambda_0\rangle$ 。然而, 对于 $k = 1$, 我们看到离开鞍点附近可能需要一个不切实际的长时间。请注意, 这些平台来源于初始状态, 它们不指数级接近单个本征态。

图 3 的下部展示了与上述相同初始化的 DB-QITE 结果，但我们注意到，在实际量子计算中，准备这样的状态可能和准备基态一样困难，如果不是更难的话。也就是说，我们首先基于一个可以通过几乎简单的电路来制备的“固定” VQE 初始化发现了 $|\Psi_0^{(k)}\rangle$ 展现的现象。如预期的那样，DB-QITE 迅速抑制了高能量成分，但与精确 ITE 不同，在步数为 $k \leq 5$ 的现实情况下，它无法达到真正最小值。这种差异可以通过方程 (15) 中提到的波动-制冷关系来解释，该关系表明每一步的能量减少率与状态的能量方差成正比，而设计上 $|\Psi_0^{(k)}\rangle$ 的能量方差较小。在离散设置中，初始状态中的低方差要大得多地阻碍进展。

5 讨论与展望

我们的工作展示了一种系统的方法来构建用于虚时间演化的量子电路，而无需依赖启发式变分策略。通过利用 DBF 和 ITE 之间的关系，我们探讨了 DB-QITE——一种迭代交替正向和反向演化并带有反射操作的量子算法。我们的分析证实，DB-QITE 保留了 ITE 的能力，即通过黎曼流形上的梯度下降来准备基态，并且冷却速率与能量波动成正比，这在几何上可以解释为梯度流的速度。此外，我们还识别出特定情况下 DB-QITE 可能无法收敛到基态，这有助于我们理解如何设计初始化以避免瓶颈。使用 Qrisp 编程框架，我们提供了带有明确门计数的 DB-QITE 数值示例。

展望未来，我们计划探索 DB-QITE 在嘈杂的中等规模量子 (NISQ) 硬件上的性能，并研究真实设备噪声如何影响向准确基态解的收敛。另一个自然的扩展包括优化电路设计和参数化策略以更有效地处理更大的系统规模。最后，将 DB-QITE 与错误缓解或经典后处理技术结合可能会进一步提高其性能，为复杂多体系统的实际量子模拟铺平道路。

Acknowledgments. MG 得到了新加坡南洋理工大学助理教授启动基金的支持，该基金由 Nelly Ng 获得。LX 得到了教育部一级研究基金 023816-00001 “催化量子安全：在量子通信协议中连接理论与实践”的支持。RS 和 RZ 在欧盟地平线欧洲研究和创新计划下的编号为 101119547 的资助协议 PQ-REACT 范围内进行了这项工作。

Disclosure of Interests. 作者声明与本文内容相关的不存在任何利益冲突。

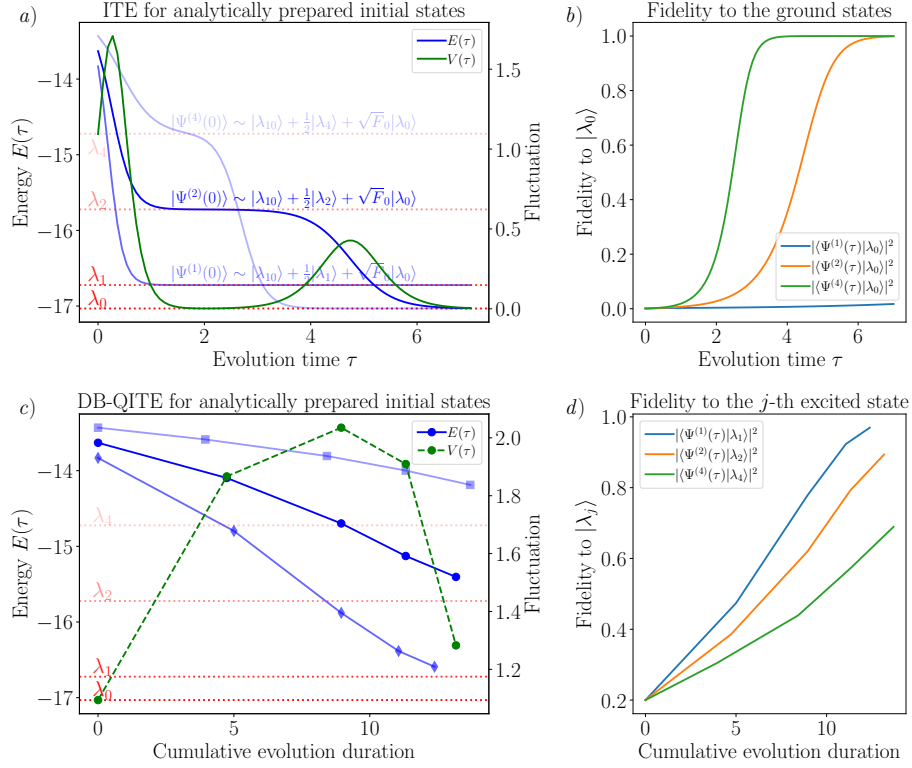


图 3. ITE(a,b) 和 DB-QITE(c,d) 用于具有 $J = 1, B = 0.5$ 的 10 量子比特海森堡模型, 起始状态为 $|\Psi_0^{(j)}\rangle$, 具有 $j = 1, 2, 4$, 这些状态偏向于从一个高能量状态 (大约为 $|\lambda_{10}\rangle$) 通过较低本征态 $|\lambda_j\rangle$ 的附近过渡, 最终达到基态 $|\lambda_0\rangle$ 。 $|\lambda_j\rangle$ 可以解释为 ITE 的鞍点, 因为能量下降几乎完全停滞。a) ITE 能量下降分为三个阶段。当 τ 较小时, 能量 $E(\tau)$ (蓝色阴影代表 $j = 1, 2, 4$) 迅速下降。随着 τ 增加, 能量波动 $V(\tau)$ ($j = 2$ 为绿色) 下降到 0, 我们达到鞍点 λ_j 。b) ITE 能量变得停滞, 直到 $|\Psi^{(j)}(\tau)\rangle$ 与基态 $|\lambda_0\rangle$ 获得大约 50% 的保真度。然而, 当能隙太小, 比如在 $|\Psi^{(1)}(0)\rangle$ 的情况下, 离开鞍点附近需要花费很长时间才能达到基态。c) 能量期望值 E_k ($j = 1, 2, 4$ 的蓝色阴影) 相对于累积 QITE 持续时间不同初始状态和能量波动 V_k 对于 $|\Psi^{(2)}(\tau)\rangle$ (绿色)。限制电路深度到当前量子硬件的能力范围内, 我们只能探索高能态消退的第一个区域, 在达到底层鞍点的瓶颈之前。能量波动 V_k 的幅度与 ITE 第一个峰值的能量波动相当。d) 对 $|\lambda_j\rangle$ 的保真度, 即 DB-QITE 正接近瓶颈阶段。

参考文献

1. Alexeev, Y., Amsler, M., et al.: Quantum-centric supercomputing for materials science: A perspective on challenges and future directions. *Future Generation Computer Systems* **160**, 666–710 (2024).
2. Balauca, S., Arusoae, A.: Efficient constructions for simulating multi-controlled quantum gates. In: Groen, D., de Mulatier, C., Paszynski, M., Krzhizhanovskaya, V.V., Dongarra, J.J., Sloot, P.M.A. (eds.) *Computational Science – ICCS 2022*. pp. 179–194. Springer International Publishing, Cham (2022).
3. Bloch, A.M.: Steepest descent, linear programming and Hamiltonian flows. *Contemp. Math. AMS* **114**, 77–88 (1990).
4. Bosse, J.L., Montanaro, A.: Probing ground state properties of the kagome anti-ferromagnetic Heisenberg model using the variational quantum eigensolver. *Phys. Rev. B* **105**, 094409 (2022).
5. Childs, A.M., Su, Y., et al.: Theory of Trotter Error with Commutator Scaling. *Phys. Rev. X* **11**, 011020 (2021).
6. Dirr, G., Helmke, U.: Lie theory for quantum control. *GAMM-Mitteilungen* **31**(1), 59–93 (2008).
7. Gell-Mann, M., Low, F.: Bound states in quantum field theory. *Phys. Rev.* **84**, 350–354 (1951). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.84.350>.
8. Gidney, C.: Halving the cost of quantum addition. *Quantum* **2**, 74 (2018).
9. Gluza, M.: Double-bracket quantum algorithms for diagonalization. *Quantum* **8**, 1316 (2024).
10. Gluza, M., Son, J., et al.: Double-bracket quantum algorithms for quantum imaginary-time evolution. *arXiv preprint arXiv:2412.04554* (2024).
11. Gomes, N., et al.: Adaptive variational quantum imaginary time evolution approach for ground state preparation. *Advanced Quantum Technologies* **4**(12), 2100114 (2021).
12. Hackl, L., Guaita, T., et al.: Geometry of variational methods: dynamics of closed quantum systems. *SciPost Phys.* **9**, 048 (2020).
13. Helmke, U., Moore, J.B.: *Optimization and Dynamical systems*. Springer London (2012).
14. Kurniawan, I., Dirr, G., et al.: Controllability aspects of quantum dynamics: a unified approach for closed and open systems. *IEEE transactions on automatic control* **57**(8), 1984–1996 (2012).

15. de Lima Silva, T., Taddei, M.M., et al.: Fragmented imaginary-time evolution for early-stage quantum signal processors. *Scientific Reports* **13**, 18258 (2023).
16. Lotfi, V., Sarin, S.: A graph coloring algorithm for large scale scheduling problems, *Computers & Operations Research* **13**(1), 27–32 (1986).
17. McArdle, S., Endo, S., et al.: Quantum computational chemistry. *Rev. Mod. Phys.* **92**, 015003 (2020).
18. McArdle, S., et al.: Variational ansatz-based quantum simulation of imaginary time evolution. *npj Quantum Information* **5**(1), 75 (2019).
19. Moore, J., Mahony, R., et al.: Numerical gradient algorithms for eigenvalue and singular value calculations. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications* **15**(3), 881–902 (1994).
20. Motta, M., Sun, et al.: Determining eigenstates and thermal states on a quantum computer using quantum imaginary time evolution. *Nature Physics* **16**(2), 205–210 (2020).
21. Robbiati, M., Pedicillo, E., et al.: Double-bracket quantum algorithms for high-fidelity ground state preparation. *arXiv preprint arXiv:2408.03987* (2024).
22. Schulte-Herbrüggen, T., Spörl, A., et al.: Optimal control for generating quantum gates in open dissipative systems. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **44**(15), 154013 (2011).
23. Schulte-Herbrüggen, T., Glaser, S., et al.: Gradient flows for optimisation and quantum control: foundations and applications. *arXiv preprint arXiv:0802.4195* (2008).
24. Seidel, R., Bock, S., et. al: Qrisp: A framework for compilable high-level programming of gate-based quantum computers. *arXiv preprint arXiv:2406.14792* (2024).
25. Smith, S.T.: Geometric optimization methods for adaptive filtering. Harvard University (1993).
26. Wiersema, R., Killoran, N.: Optimizing quantum circuits with Riemannian gradient flow. *Phys. Rev. A* **107**, 062421 (2023).
27. Yamamoto, T., Ohira, R.: Error suppression by a virtual two-qubit gate. *Journal of Applied Physics* **133**(17) (2023).