Applied Physics 应用物理, **2025, 15(4), 304-309**
Published Online April 2025 in Hans. https://www.hanspub.org/journal/app
https://doi.org/10.12677/app.2025.154035

非厄米系统虚时演化的量子模拟基础

赵瑞娟

北方工业大学理学院，北京

收稿日期：2025年3月21日；录用日期：2025年4月20日；发布日期：2025年4月28日

摘 要

非厄米量子系统哈密顿量因具有不同的对称性，在量子态快速演化、量子态区分、量子精密测量等方面展现出超越标准量子力学系统的优势和新奇特性，近二十多年来受到持续关注，成为前沿领域。量子模拟非厄米系统是主要方向之一，又是研究非厄米系统的重要手段。典型的非厄米系统包括宇称－时间(Party-Time，简称PT)对称系统和赝厄米对称系统等。已有研究集中于对非厄米系统的时间演化开展量子模拟。文章围绕非厄米系统的虚时演化算符进行研究，通过计算非厄米系统的虚时演化算符，为开展典型非厄米系统的虚时演化量子模拟理论研究打下基础。我们的研究从理论上拓展了量子计算机可模拟新奇系统的范畴，并将虚时演化拓展至非厄米系统。基于我们对非厄米系统的虚时演化理论研究，对利用不同的量子系统和量子真机开展实验研究具有指导作用。

关键词

量子模拟，非厄米，虚时演化，PT对称系统，赝厄米系统

Quantum Simulation Foundations of Imaginary-Time Evolution of Non-Hermitian Systems

Ruijuan Zhao

College of Science, North China University of Technology, Beijing

Received: Mar. 21st, 2025; accepted: Apr. 20th, 2025; published: Apr. 28th, 2025

Abstract

The Hamiltonian of non-Hermitian quantum systems, due to its different symmetries, has shown advantages and novel properties beyond standard quantum mechanical systems in terms of rapid

文章引用: 赵瑞娟. 非厄米系统虚时演化的量子模拟基础[J]. 应用物理, 2025, 15(4): 304-309.
DOI: 10.12677/app.2025.154035

quantum state evolution, quantum state differentiation, quantum precision measurement, etc., which has attracted continuous attention and become a frontier field in the past two decades. Quantum simulation of non-Hermitian systems is one of the main directions and an important means to study non-Hermitian systems. Typical non-Hermitian systems include parity-time (PT) symmetric systems and pseudo Hermitian symmetric systems. Previous studies have focused on the quantum simulation of the time evolution of non-Hermitian systems. In this paper, the virtual time evolution operators of non-Hermitian systems are studied. By calculating the virtual time evolution operators of non-Hermitian systems, it lays a foundation for the theoretical study of virtual time evolution of typical non-Hermitian systems. Our research theoretically expands the range of novel systems that quantum computers can simulate, and extends virtual time evolution to non-Hermitian systems. Based on our research on the virtual time evolution theory of non-Hermitian systems, it has a guiding role to carry out experimental research with different quantum systems and quantum real machines.

Keywords

Quantum Simulation, Non-Hermitian, Virtual Time Evolution, PT-Symmetric System, Pseudo Hermitian System

1. 引言

随着量子计算技术的快速发展，利用量子计算机模拟虚时演化过程已成为当前研究的前沿方向。然而，由于虚时演化算符的非幺正特性，其无法直接在物理系统上实现。针对这一挑战，研究者们提出了三种主要的量子计算模拟方案：变分虚时演化(VITE) [1] [2]、量子虚时演化(QITE) [3]以及概率性虚时演化(PITE) [4]-[6]。传统的量子力学主要研究厄米系统，而非厄米系统引入了耗散、增益等复杂因素，虚时演化的研究有助于拓展量子力学的理论框架，揭示非厄米系统的独特性质。典型的非厄米系统包括宇称－时间(Party-Time，简称 PT)对称系统和赝厄米对称系统等。已有研究集中于对非厄米系统的时间演化开展量子模拟，本论文对 PT 对称，PT 反对称，任意子 PT 对称和 P-赝厄米对称系统的虚时演化算符进行计算，为开展非厄米系统的虚时演化量子模拟理论研究打下基础。

2. 虚时演化

虚时演化方法的核心在于通过 Wick 旋转实现时间概念的转换，即用虚时间参数($-i\tau$)替代实时间变量(t)。这种数学变换建立了欧几里得空间与闵可夫斯基空间之间的对应关系，同时架起了量子力学与统计力学之间的桥梁。通过这种转换，原本的动力学问题可以转化为静态问题进行处理，为解决复杂量子系统提供了新的理论工具和计算途径。

3. 二维 PT 对称、PT 反对称和任意子 PT 对称系统

在量子力学理论的发展历程中，Bender [7]和 Boettcher 于 1998 年提出的 PT 对称量子理论具有里程碑意义。该理论突破性地证明，在满足特定对称性条件的情况下，即使哈密顿量不具备厄米性，其本征值仍可能保持为实数。这一发现极大地拓展了量子力学的理论框架。关键性的宇称－时间(Parity-Time, PT)对称性，其哈密顿量可表示为：

$$H = (PT)^{-1} HPT \tag{1}$$

式中，宇称算子 P，时间演化算子 T。

选取宇称算符 $P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$，反线性算子时间反演 T 满足 $T\varphi = \bar{\varphi}$，其形式是：

$$T\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\varphi}_1 \\ \bar{\varphi}_2 \end{pmatrix}, \forall \varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2 \tag{2}$$

因此，推出二能级量子系统的 PT 对称哈密顿量为

$$H_{PT} = \begin{pmatrix} re^{i\theta} & s + \omega i \\ s - \omega i & re^{-i\theta} \end{pmatrix} \tag{3}$$

其中 r, s, ω, θ 是实数。

在二能级系统中，PT 对称的哈密顿量的本征值为 $\varepsilon_{\pm} = rcos\theta \pm \frac{\Delta_{PT}}{2}$，对应两个本征态$|\varepsilon_{\pm}\rangle$，其中 $\Delta_{PT} = \varepsilon_{+} - \varepsilon_{-} = 2\sqrt{s^2 + \omega^2 - r^2 sin^2\theta}$ 是系统的能级差。该 Δ_{PT} 只能是实数或纯虚数。

PT 对称和 PT 反对称哈密顿量 H_{PT} 和 H_{APT} 分别是满足换向和反换向

$$[PT, \mathcal{H}_{PT}] = 0, \{PT, \mathcal{H}_{APT}\} = 0 \tag{4}$$

其中 $[A, B] = AB - BA, \{A, B\} = AB + BA$，

当宇称算子 P 反转位置和时间反转 T 生效时，$i \to -i$ 的复杂共轭变化发生变化。鉴于前一次 i 偶尔会变成 PT 反对称哈密顿量，反之亦然，H_{PT} 和 H_{APT} 可以被认为是彼此的实部和虚部。也可以通过将 PT 对称哈密顿量与虚数 i 相乘 $H_{APT} = iH_{PT}$ 来构造。

PT 反对称二能级系统的哈密顿量表示如下：

$$H_{APT} = iH_{PT} = i\begin{pmatrix} re^{i\theta} & s + \omega i \\ s - \omega i & re^{-i\theta} \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$\Delta_{APT} = i\Delta_{PT} = 2\sqrt{-s^2 - \omega^2 + r^2 sin^2\theta}$$

考虑一个非厄米哈密顿量 H，它满足

$$H_{PT}\Delta(PT)H(PT)^{-1} = e^{i\varphi}H \tag{6}$$

显然，H 可以通过相位因子 $e^{-i\frac{\varphi}{2}}$ 定时 $H_{PT} = e^{i\frac{\varphi}{2}}H$ 得到，这是 PT 对称哈密顿量的复杂推广

$$H = e^{-i\frac{\varphi}{2}}H_{PT} = cos\frac{\varphi}{2}H_{PT} - sin\frac{\varphi}{2}(iH_{PT}) \tag{7}$$

转置满足反 PT 对称性的 $H_{APT} = iH_{PT}$，那么

$$H = cos\frac{\varphi}{2}H_{PT} - sin\frac{\varphi}{2}(H_{APT}) \tag{8}$$

以视为 H_{PT} 和 H_{APT} 的混合组合。因此，我们表征具有任意子 PT 对称性或 $PT-\varphi$ 对称性。PT 对称，PT 反对称和任意子 PT 对称之间的关系可以比作 Boson，Fermion 和 anyon 的关系。因此，预计 H 将表现出介于前两类之间的属性。实际上，在等式 $H = cos\frac{\varphi}{2}H_{PT} - sin\frac{\varphi}{2}(H_{APT})$ 中表达的关系分别统一了 $\varphi = 2k\pi$ 和 $\varphi = (2k+1)\pi$ (其中 k 是整数)的 PT 和 PT 反对称性。需要注意的是，

$H=cos\frac{\varphi}{2}H_{PT}-sin\frac{\varphi}{2}\left(H_{APT}\right)$不仅适用于二维情况，也适用于更一般的场景。

在二维情况下，任意子 PT 对称的哈密顿量最一般的形式是

$$H=e^{-i\frac{\varphi}{2}}\begin{pmatrix} re^{i\theta} & s+\omega i \\ s-\omega i & re^{-i\theta} \end{pmatrix} \tag{9}$$

其中$\varphi,r,s,\omega,\theta$是实数，宇称算符$P=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$和$\varphi$是固定为与对称性的联系。事实上，一般的 PT 对称哈密顿量时间$e^{-i\frac{\varphi}{2}}$可以产生。

H的本征值分别为$\varepsilon_{\pm}=e^{-i\frac{\varphi}{2}}\left(r\,cos\theta\pm\frac{\Delta_0}{2}\right)$，对应两个本征态$|\varepsilon_{\pm}\rangle$，其中

$\Delta_0=e^{-i\frac{\varphi}{2}}\left(\varepsilon_{+}-\varepsilon_{-}\right)=2\sqrt{s^2+\omega^2-r^2sin^2\theta}$是$H_0=e^{i\frac{\varphi}{2}}\mathrm{H}$的能量差。

当$s^2+\omega^2\geq r^2sin^2\theta$时，$H_0$具有精确的 PT 对称性(或$H_0$的 PT 对称性未被破坏)，在这种情况下，$H_0$的两个本征态是 PT 操作。否则，$H_0$的 PT 对称性是自发破缺的(broken)。$H$在参数空间中的异常点(EPs)对应于导致$\Delta_0=0$的值，描绘破缺和未破缺的 PT 对称性之间的边界。

4. 计算虚时演化算符

任意子 PT 对称系统的时间演化算子$e^{-i\frac{t}{\hbar}H}$控制，经过虚时演化 wick rotation $\tau=it$，PT 对称系统的虚时演化算子由$e^{-\frac{\tau}{\hbar}H}$控制，$e^{-\frac{\tau}{\hbar}H}$是非幺正的。类似的，PT 对称系统的虚时演化算子由$e^{-\frac{\tau}{\hbar}H_{PT}}$控制，PT 反对称的虚时演化算子由$e^{-\frac{\tau}{\hbar}H_{APT}}$控制。下面我们介绍如何计算系统的虚时演化算符。

以任意子 PT 对称的哈密顿量 H 为例，任意子 PT 对称系统哈密顿量 H，以公式(9)为例，可进一步表示为如下形式：

$$e^{-\frac{i\varphi}{2}}\left(r\cos\theta I+s\sigma_1-\omega\sigma_2+ir\sin\theta\sigma_3\right) \tag{10}$$

其中$\sigma_0=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\sigma_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\sigma_2=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\sigma_3=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$是 Pauli 矩阵。

因此，任意子 PT 对称的虚时演化算符$e^{-\frac{\tau}{\hbar}H_{PT}}$可表示为

$$e^{-\frac{\tau}{\hbar}e^{-\frac{i\varphi}{2}}\left(r\cos\theta I+s\sigma_1-\omega\sigma_2+ir\sin\theta\sigma_3\right)} \tag{11}$$

进一步展开得到

$$e^{-\frac{\tau}{\hbar}H_{PT}}=e^{-\frac{\tau}{\hbar}e^{-\frac{i\varphi}{2}}r\cos\theta I}.e^{-\frac{\tau}{\hbar}e^{-\frac{i\varphi}{2}}\left(s\sigma_1-\omega\sigma_2+ir\sin\theta\sigma_3\right)}=U_IU_{\sigma} \tag{12}$$

我们利用泰勒公式$e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\ldots$对$U_I,U_{\sigma}$进行展开再合并得到：

$$U_I=Ie^{-\frac{\tau}{\hbar}e^{-\frac{i\varphi}{2}}r\cos\theta} \tag{13}$$

$$U_{\sigma}=cos\left(\alpha'\right)I-i\frac{1}{\Delta}\sin\left(\alpha'\right)\left(s\sigma_1-\omega\sigma_2+ir\sin\theta\sigma_3\right) \tag{14}$$

其中 $\Delta=2\sqrt{s^2+\omega^2-r^2sin^2\theta}$，$\alpha'=\dfrac{\Delta(-i\tau)e^{-i\frac{\varphi}{2}}}{2\hbar}$

最终我们得到任意子 PT 对称系统的虚时演化算符 $e^{-\frac{\tau}{\hbar}H}$ 为

$$e^{-\frac{\tau}{\hbar}e^{-i\frac{\varphi}{2}}rcos\theta}\begin{pmatrix} cos\alpha'+\dfrac{2rsin\theta sin\alpha'}{\Delta} & \dfrac{2\omega sin\alpha'}{\Delta}-\dfrac{2ssin\alpha'}{\Delta}i \\ -\dfrac{2\omega sin\alpha'}{\Delta}-\dfrac{2ssin\alpha'}{\Delta}i & cos\alpha'-\dfrac{2rsin\theta sin\alpha'}{\Delta} \end{pmatrix} \tag{15}$$

其中 $\Delta=2\sqrt{s^2+\omega^2-r^2sin^2\theta},\ \alpha'=\dfrac{\Delta(-i\tau)e^{-i\frac{\varphi}{2}}}{2\hbar}$，以上 φ,r,s,ω 和 θ 都是实数

模仿上述过程我们可以得到 PT 对称系统，PT 反对称系统的虚时演化算符，结果如下：

PT 对称的虚时演化算符 $e^{-\frac{\tau}{\hbar}H_{PT}}$ 为

$$e^{-\frac{\tau}{\hbar}rcos\theta}\begin{pmatrix} \cos\alpha'+\dfrac{2r\sin\theta\sin\alpha'}{\Delta_{PT}} & \dfrac{2w\sin\alpha'}{\Delta_{PT}}-\dfrac{2s\sin\alpha'}{\Delta_{PT}}i \\ -\dfrac{2w\sin\alpha'}{\Delta_{PT}}-\dfrac{2s\sin\alpha'}{\Delta_{PT}}i & \cos\alpha'-\dfrac{2r\sin\theta\sin\alpha'}{\Delta_{PT}} \end{pmatrix} \tag{16}$$

其中 $\Delta_{PT}=2\sqrt{s^2+\omega^2-r^2sin^2\theta},\alpha'=\dfrac{\Delta_{PT}(-i\tau)}{2\hbar}$，以上 φ,r,s,ω 和 θ 都是实数。

PT 反对称系统虚时演化算符 $e^{-\frac{\tau}{\hbar}H_{APT}}$ 为

$$e^{\frac{-i\tau}{\hbar}r\cos\theta}\begin{pmatrix} \cos\alpha'+\dfrac{2r\sin\theta\sin\alpha'}{\Delta_{APT}}i & \dfrac{2s\sin\alpha'}{\Delta_{APT}}+\dfrac{2w\sin\alpha'}{\Delta_{APT}}i \\ \dfrac{2s\sin\alpha'}{\Delta_{APT}}-\dfrac{2w\sin\alpha'}{\Delta_{APT}}i & \cos\alpha'-\dfrac{2r\sin\theta\sin\alpha'}{\Delta_{APT}}i \end{pmatrix} \tag{17}$$

其中 $\Delta_{APT}=2\sqrt{-s^2-\omega^2+r^2sin^2\theta},\alpha'=\dfrac{\Delta_{APT}(-i\tau)}{2\hbar}$，以上 φ,r,s,ω 和 θ 都是实数。

5. 二维 P-赝厄米对称系统

赝厄米理论最初由 Pauli [8]提出，他通过引入不定度规空间建立了该理论的数学基础，其本质特征在于哈密顿量满足赝厄米性条件，这是保证实数本征值的充要条件。相应的哈密顿量可表示为：

$$H^{\dagger}=\eta\mathrm{H}\eta^{\dagger}$$

其中，η 表示线性厄米算符。

2002 年，Mostafazadeh [9]等学者基于双正交基方法，对赝厄米量子力学理论进行了系统性阐释。

在二能级量子系统中，P-赝厄米对称(PPH)系统的哈密顿量可以表示为：

$$H_{PPH}=\begin{pmatrix} re^{i\theta} & s \\ u & re^{-i\theta} \end{pmatrix} \tag{18}$$

其中，u 与 s 为实数，其他参数与 PT 对称系统相同。P-赝厄米哈密顿量的本征值为 $\varepsilon_{\pm}=rcos\theta\pm2\sqrt{su-r^2\sin^2\theta}$，系统的能极差为 $\Delta_{PPH}=2\sqrt{su-r^2\sin^2\theta}$，$\Delta_{PPH}$ 的值为实数或纯虚数。

P-赝厄米对称系统的时间演化算子由 $e^{-i\frac{t}{\hbar}H_{PPH}}$ 控制。经过虚时演化 wick rotation $\tau = it$，P-赝厄米对称系统的虚时演化算子由 $e^{-\frac{\tau}{\hbar}H_{PPH}}$ 控制，$e^{-\frac{\tau}{\hbar}H_{PPH}}$ 是非幺正的。重复第 3 章节中的虚时演化算符的过程，将其中的 H 替换为 H_{PPH}，得到 P-赝厄米对称系统的虚时演化算符 $e^{-\frac{\tau}{\hbar}H_{PPH}}$ 为

$$e^{-\frac{\tau}{\hbar}r\cos\theta}\begin{pmatrix} \cos\alpha' + \dfrac{2r\sin\theta\sin\alpha'}{\omega} & -\dfrac{2s\sin\alpha'}{\omega}i \\ -\dfrac{2u\sin\alpha'}{\omega}i & \cos\alpha' - \dfrac{2r\sin\theta\sin\alpha'}{\omega} \end{pmatrix} \tag{19}$$

其中 $\Delta_{PPH} = 2\sqrt{su - r^2\sin^2\theta}, \alpha' = \dfrac{\Delta_{PPH}(-i\tau)}{2\hbar}$，以上 φ, r, s, ω 和 θ 都是实参数。

6. 小结

本文主要介绍了将 PT 对称性和反 PT 对称性发展为任意子 PT 对称，类似于玻色子、费米子和任意子，介绍了非厄米对称系统哈密顿量的一般二能级表示。我们通过泰勒展开的方法对虚时演化算符进行了计算，得到了 PT 对称，PT 反对称，任意子 PT 对称，P-赝厄米对称系统的虚时演化算符。我们深入研究了非厄米系统的虚时演化算符，后续我们将利用酉算子的线性组合(LCU)的方法对虚时演化算符进行酉展开，以此来构建量子模拟线路，并通过计算量子线路模拟非厄米系统虚时演化的成功概率分析其中利弊。虚时演化算符的计算为后续的量子模拟提供了坚实的基础，对利用不同的量子系统和量子真机开展实验研究具有基石作用。

参考文献

[1] McArdle, S., Jones, T., Endo, S., Li, Y., Benjamin, S.C. and Yuan, X. (2019) Variational Ansatz-Based Quantum Simulation of Imaginary Time Evolution. *npj Quantum Information*, **5**, Article No. 75. https://doi.org/10.1038/s41534-019-0187-2

[2] Jones, T., Endo, S., McArdle, S., Yuan, X. and Benjamin, S.C. (2019) Variational Quantum Algorithms for Discovering Hamiltonian Spectra. *Physical Review A*, **99**, Article ID: 062304. https://doi.org/10.1103/physreva.99.062304

[3] Yeter-Aydeniz, K., Pooser, R.C. and Siopsis, G. (2020) Practical Quantum Computation of Chemical and Nuclear Energy Levels Using Quantum Imaginary Time Evolution and Lanczos Algorithms. *npj Quantum Information*, **6**, Article No. 63. https://doi.org/10.1038/s41534-020-00290-1

[4] Tan, K.C. (2020) Fast Quantum Imaginary Time Evolution. arXiv: 2009.12239.

[5] Sun, S.N., Motta, M., Tazhigulov, R.N., Tan, A.T., Chan, G.K.L. and Minnich, A.J. (2021) Quantum Computation of Finite-Temperature Static and Dynamical Properties of Spin Systems Using Quantum Imaginary Time Evolution. *PRX Quantum*, **1**, Article ID: 010317.

[6] Motta, M., Sun, C., Tan, A.T.K., O'Rourke, M.J., Ye, E., Minnich, A.J., *et al*. (2019) Determining Eigenstates and Thermal States on a Quantum Computer Using Quantum Imaginary Time Evolution. *Nature Physics*, **16**, 205-210. https://doi.org/10.1038/s41567-019-0704-4

[7] Bender, C.M. and Boettcher, S. (1998) Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Havingptsymmetry. *Physical Review Letters*, **80**, 5243-5246. https://doi.org/10.1103/physrevlett.80.5243

[8] Pauli, W. (1943) On Dirac's New Method of Field Quantization. *Reviews of Modern Physics*, **15**, 175-207. https://doi.org/10.1103/revmodphys.15.175

[9] Mostafazadeh, A. (1998) Two-Component Formulation of the Wheeler-Dewitt Equation. *Journal of Mathematical Physics*, **39**, 4499-4512. https://doi.org/10.1063/1.532522