arXiv:2302.01922v1 [quant-ph] 3 Feb 2023

变分波导量子电动力学模拟器

C. Tabares、A. Mu˜noz de las Heras、L. Tagliacozzo、D. Porras 和 A. Gonz´alez-Tudela*
Institute of Fundamental Physics IFF-CSIC, Calle Serrano 113b, 28006 Madrid, Spain（日期：2023年2月6日）

波导量子电动力学模拟器是由量子发射体与一维光子带隙材料相互作用构成的模拟量子模拟器。其显著特点之一是可用于实现相互作用范围可调的发射体相互作用。本文展示了如何利用这些相互作用，为某些问题开发更高效的变分量子算法。具体而言，我们说明了这类相互作用在构造波函数 ans¨atze 方面的作用；这类波函数能够准确捕获量子临界自旋模型（XXZ模型和伊辛模型）的基态，并且所需的量子门和优化参数少于其他基于最近邻或无限程纠缠门的变分 ans¨atze。最后，我们研究了在存在噪声时这些波导 ans¨atze 的潜在优势。总而言之，这些结果证明了将相互作用范围用作变分参数的潜力，并表明波导量子电动力学模拟器是变分量子算法的一种有前景的平台。

引言.-变分量子算法（VQAs）[1, 2]旨在利用当前含噪中等规模量子（NISQ）设备 [3]，赶在容错时代到来之前发挥其作用。这类算法借助经典优化器的能力，寻找单量子比特门和多量子比特门的组合（即构造参数化量子电路，或称试探态），以最小化给定的代价函数。代价函数通常是使用参数化量子电路构造的量子态中某个算符的期望值，并在量子硬件上测量。一个典型例子是变分量子本征求解器（VQE）[4]，其代价函数是给定多体哈密顿量的能量，例如用于量子化学 [5–11] 或高能物理问题 [12–16]，等领域。不过，通过改变代价函数，变分量子算法还可以解决组合优化问题 [17–22]，，并应用于量子机器学习 [23, 24] 或量子计量协议 [25–28]。

与经典变分方法一样，VQA 的能力在很大程度上取决于试探态。首先，试探态需要具有足够的表达能力，才能准确捕捉目标问题的解。虽然增加更多量子门可以覆盖更广的希尔伯特空间区域，但只包含少量量子门的电路，在通过测量 [4], 估算代价函数及其梯度时复杂度较低，也不易受到误差影响。因此，理想情况下，试探态应尽可能少用量子门来再现感兴趣的现象。此外，它还应避免贫瘠高原问题，即优化景观变得平坦；随着量子比特数量增加 [29] 以及试探态的表达能力增强¨atze [30]，这一问题尤其严重。当前最先进的试探态分为硬件高效试探态 ¨*atze* [6], 和问题定制型试探态：前者受设备的连接方式启发，后者则包括幺正耦合簇 [5]和哈密顿量变分试探态（HVAs）[31–35], 等，灵感源自问题结构。前者更自然地适用于

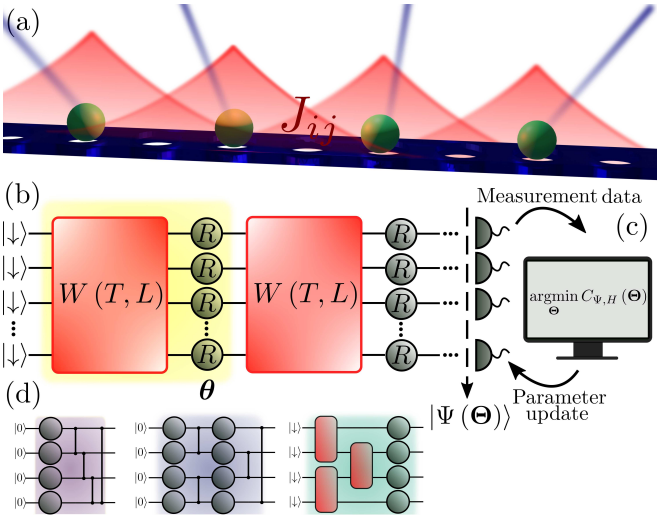


图 1. (a) 波导带隙区域中的原子（绿色）具有光学跃迁，可形成光子束缚态（红色），进而产生可调作用范围的发射体相互作用 $J_{ij} \sim e^{-|x_i-x_j|/L}$，这些相互作用可通过外部激光器（蓝色）进行控制。(b) 将原子视为量子比特，这些相互作用会产生纠缠操作（红色），并可与单量子比特旋转 $R(\boldsymbol{\theta})$ 组合，构成变分量子电路的一层（黄色），以生成状态 $|\Psi(\boldsymbol{\Theta})\rangle$。(c) 对该状态下可观测量 H 的测量定义了代价函数 $C_{\Psi,\,H}(\boldsymbol{\Theta})$，并使用经典处理器对其进行最小化。(d) 其他相关电路的示意图，这些电路采用最近邻纠缠门，例如硬件高效拟设（HEA）（紫色）、砖层拟设（深蓝色）和哈密顿量变分拟设（HVA）（浅蓝色）。

在最先进的 NISQ 设备上实现时，后者更易于优化，因为其结构既能避免贫瘠高原，又具有足够的表达能力来捕获解 [35]。然而，这类问题启发式变分量子算法也受到当前硬件连接能力的限制。因此，尽管已有许多变分量子算法的原理验证示例 [5, 6, 12, 36], ，但所考虑的所有 ans¨atz 均未能彻底解决现有挑战。这就是为何寻找

* a.gonzalez.tudela@csic.es

更高效的 ans¨atz 成为 NISQ时代最迫切的问题之一。

在这项工作中，我们介绍并表征了一种不同类型的试探态，其灵感来自结构化波导量子电动力学（ wQED）装置中可实现的相互作用 [37–53]。这类系统中，量子发射体与具有非线性能量色散的一维光子模相互作用 [见图 1(a)]。当发射体的光学跃迁频率处于光子带隙内时，波导模式会诱导出相干且作用范围可调的相互作用 [54–56] ，可用于在发射体之间构造多量子比特纠缠门。在此，我们构建了结合此类作用范围可调量子门与单量子比特旋转的试探态¨见图 1(b)] ，并实施变分量子本征求解器，以证明与现有试探态相比，它们能够用更少的量子门表示临界自旋模型的基态（GS） [。 wQED 试探态与现有试探态的关键区别在于，它能够动态调节相互作用范围，我们将其作为变分参数。这使算法能够以少于标准固定范围连接试探态的量子门数，找到呈现长程关联的状态¨。最后，我们研究了在存在噪声时减少量子门数量所带来的影响¨。

波导量子电动力学变分 *Ansatz*。-我们考虑的物理装置总结于图 1(a)。它由若干发射体组成，这些发射体可由激光器单独或整体寻址，并与一维波导耦合。尽管我们将发射体描绘为原子，将波导描绘为光子晶体波导 [57, 58], ，但我们的发现可推广至具有不同发射体（例如固态发射体 [41–47]）和/或波导（如微波超材料 [48–52] 或物质波波导 [53]）的其他波导量子电动力学平台。假设发射体通过两个态 g 和 e 之间的有效跃迁与波导模式耦合，且该跃迁的频率位于带隙内；在光子场可被绝热消除的条件下，发射体的动力学由下列哈密顿量描述 [54–56]:

$$H_{\mathrm{XX}} = J \sum_{i \neq j} e^{-|x_i - x_j|/L} \sigma^i_{\mathrm{eg}} \sigma^j_{\mathrm{ge}} \,, \tag{1}$$

其中， J 为相互作用强度， L 为其有效范围，该范围取决于有效跃迁频率与带边之间的失谐，因此可动态调节 [59–61], x_i 为原子位置， $\sigma^i_{\mathrm{ge}} = |g\rangle_i \langle e|_i$ 为跃迁偶极算符。类似地，如文献 [54–56] 和补充材料（SM） [62], 所示，如果发射体具有两个与波导模式耦合的光学激发态，也可以得到有效哈密顿量 $H_{\mathrm{I}} = J \sum_{i \neq j} e^{-|x_i - x_j|/L} \sigma^i_{\mathrm{x}} \sigma^j_{\mathrm{x}}$, 其中 $\sigma^i_{\mathrm{x}} = (\sigma^i_{\mathrm{eg}} + \sigma^i_{\mathrm{ge}})/2$ 为 x 方向的泡利矩阵。将这些哈密顿量作用一段时间 t，即可分别得到由酉算符 $W_{\mathrm{XX}}(T,\ L) = e^{-itH_{\mathrm{XX}}}$ 或 $W_{\mathrm{I}}(T,\ L) = e^{-itH_{\mathrm{I}}}$描述的多量子比特门。这类量子门可用两个可调参数 [（见图 1(b)）]来参数化：归一化相互作用时间 $T = tJ$及其有效范围 L。为了构建我们的波导量子电动力学试探态，我们将这些酉算符与单量子比特旋转串接起来，例如沿 z 方向的旋转，其酉算符表示为 $R(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{j=1}^{N} e^{-i\theta_j \sigma^j{}_z}$, 其中 $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1,\ \theta_2,\ \ldots)$。wQED 变分 Ansatz 由 D次重复或层 构成，每层均包含上述单量子比特和多量子比特酉算符的组合，见图 1(b)，其全局酉算符表示为:

$$U_{\mathrm{wQED}-\alpha}(\boldsymbol{\Theta}) = \prod_{i=1}^{D} R_i(\boldsymbol{\theta}^i) W_{i,\alpha}(T_i, L_i) \,, \tag{2}$$

其中， $\boldsymbol{\Theta} = (\boldsymbol{\theta},\ \boldsymbol{T},\ \boldsymbol{L})$ 是包含所有变分参数的向量，而 $\alpha =$则根据所选的耦合构型取 XX 或 I。

使用波导量子电动力学试探态的变分量子本征求解器 ¨试探态——变分量子本征求解器的主要步骤如下 [4]（更多说明见补充材料 [62]）： i) 将多量子比特系统初始化为某个状态 $|\Psi_0\rangle$。ii) 初始态作为参数化量子线路试探态的输入，该试探态由酉算符 $U(\boldsymbol{\Theta})$ 描述，并采用一组初始变分参数 $\boldsymbol{\Theta}$。输出为最终态 $|\Psi(\boldsymbol{\Theta})\rangle = U(\boldsymbol{\Theta})\ |\Psi_0\rangle$。iii) 计算代价函数，即多体哈密顿量的期望值 $C(\boldsymbol{\Theta}) = \langle\Psi(\boldsymbol{\Theta})|\, H\, |\Psi(\boldsymbol{\Theta})\rangle$ 。iv) 最后，将 $C(\boldsymbol{\Theta})$ 的值输入经典优化器，由其更新参数。重复此过程，直至能量不再显著变化；这意味着变分量子本征求解器已找到使 H 的能量最小化的最优参数 $\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{opt}}$ ，除非陷入某个局部极小值 [29, 30]。因此，该能量值是实际基态能量的上界。

在下文中，我们将这一过程应用于多个量子临界自旋模型。这些模型是颇具意义的基准，因为其基态具有长程关联，而长程关联是经典和量子算法最难捕捉的特征之一 [63–65]。我们采用一种绝热辅助变分量子本征求解算法 [66], ，详见补充材料 [62], ，并将 wQED 变分 Ansatz¨的性能与文献中最常用的固定结构试探态¨进行比较 [。图 1(d) 给出了这些量子线路的示意图]: 硬件高效线路模板（HEA） [6] ，其基于沿三个空间方向串联单量子比特旋转，并以双量子比特受控-Z（CZ）门作为纠缠门；砖层拟设，其中纠缠 CZ 门按顺序引入，并穿插单量子比特旋转；最近邻哈密顿量变分线路模板，其中各层由所研究自旋哈密顿量的二阶 Trotter 分解给出 [35]；此外还与全连接拟设进行比较。全连接拟设是一种 wQED 变分 Ansatz，在其中我们取 $L \to \infty$。后者有助于辨别潜在优势究竟源于 wQED 相互作用的长程特性，还是源于其动态可调性。此外，对于腔量子电动力学装置而言，这些结果也可能颇具意义 [67–73], ，因为无限程相互作用会在其中自然出现。

我们首先考虑 XXZ模型 [74]

$$H_{\mathrm{XXZ}} = \sum_i \left(\sigma^i_{\mathrm{x}} \sigma^{i+1}_{\mathrm{x}} + \sigma^i_{\mathrm{y}} \sigma^{i+1}_{\mathrm{y}}\right) - \Delta \sum_i \sigma^i_{\mathrm{z}} \sigma^{i+1}_{\mathrm{z}} \tag{3}$$

在其铁磁海森堡点 $\Delta = 1$。在图 2(a-

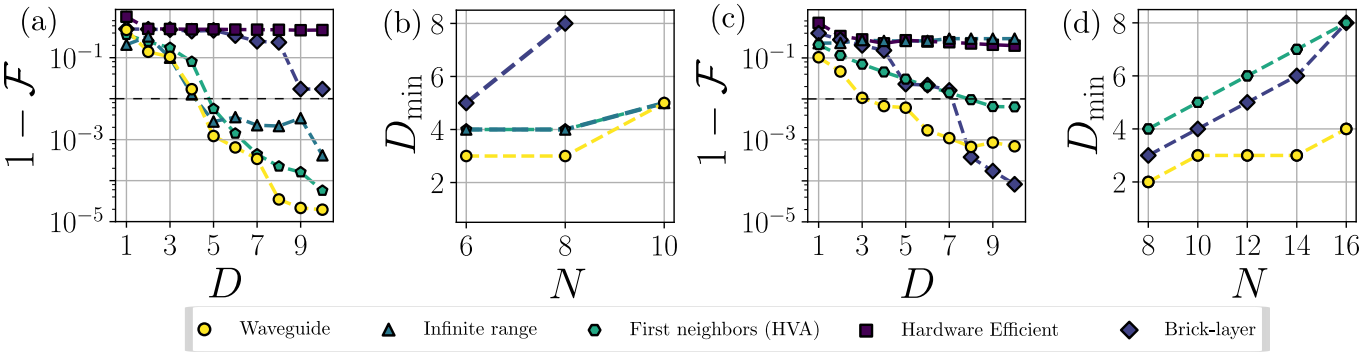


图 2. (a) 对于含有 $N = 10$ 个量子比特的系统，XXZ模型的精确基态与采用不同试探态（见下方图例）得到的优化变分态之间的保真度损失 $1-\mathcal{F}$ 随层数 D 的变化。(b) 对于不同数量的量子比特 N，达到 99% 以上保真度 $\mathcal{F}$ 所需的最小深度 D（注意，并非所有试探态都能达到这一保真度）。(c-d) 与 (a-b) 相同，但研究对象由 XXZ模型换为横场伊辛模型。图 (c) 中的系统规模为 $N = 16$ 个量子比特。

b) 中，我们评估了公式1的 wQED-XX拟设（黄色圆圈）相对于上述试探态的性能。选择这一 wQED 试探态，是因为 H_{XX} 与 XXZ模型中出现的相互作用相似。为评估试探态的性能，我们计算保真度损失：

$$1-\mathcal{F} = 1 - |\langle\Psi(\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{opt}})|\Psi_{\mathrm{GS}}\rangle|, \tag{4}$$

其中 $|\Psi_{\mathrm{GS}}\rangle$ 是模型的基态，$|\Psi(\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{opt}})\rangle$ 是 VQE 找到的能量最低的态。在图 2(a) 中，我们绘出了 $N = 10$ 个量子比特时保真度损失随量子线路深度 D （即层数）的变化。对于大多数试探态，增加层数通常会提高保真度。这是意料之中的，因为更深的量子线路包含更多变分参数，有助于探索希尔伯特空间中更大的区域，并更接近基态 [63, 75]。然而，我们发现 wQED-XX拟设的表现优于其他方法。为确认这一点，我们计算了若干 N 的保真度达到 99% 以上所需的量子线路深度，发现与其他试探态相比，wQED-XX拟设只需更浅的量子线路，就能更好地逼近基态 [（见图 2(b)]）。这种浅层特性具有优势，因为它能提高系统抵抗噪声的能力，并减少优化循环中所需的测量次数。

研究横场伊辛模型（TFIM）时，这一优势更加明显。

$$H_{\mathrm{Ising}} = -\sum_i \sigma_{\mathrm{x}}^i \sigma_{\mathrm{x}}^{i+1} + g\sum_i \sigma_{\mathrm{z}}^i, \tag{5}$$

在临界点 $g = 1$。结果如图 2(c-d) 所示。在这种情况下，我们使用 wQED-I 变分 Ansatz，这同样是由于 H_{I} 中出现的伊辛相互作用与目标问题中的相互作用相似。除此之外，值得注意的是，这里我们使用了全局单量子比特旋转，与其他试探态 ¨ 相比，这大幅减少了参数数量 [62], ，并简化了实验实现，因为可以对发射体进行全局寻址。结果的

试探态 ¨ 的比较结果见图 2(c)。其中，我们将量子比特数量固定为 $N = 16$，并展示了对于大多数试探态 ¨，保真度损失会随电路深度 D 增加而降低。由于 wQED-I 变分 Ansatz 具有特殊结构，在这种情况下，我们可以针对更大的 $6 \le N \le 16$ 值对试探态 ¨ 进行基准测试，而它给出的结果最准确，尤其是在电路深度较低时。图 2(d) 也证实了这一点：我们绘出了试探态 ¨ 达到 99% 以上保真度所需的深度。由此可见，wQED-I 变分 Ansatz 总能以更小的 D 达到所需保真度。另一个值得注意的现象是，全连接拟设的表现不如这两种 wQED 试探态 ¨。这表明，使后者能够更好地再现基态的幂律关联并优于其他方法的，是相互作用范围的动态调控，而非其长程特性。

最后，我们检验 wQED 变分 Ansatz 在具有长程相互作用的模型中的表现，例如长程横场伊辛模型（LRTFIM）：

$$H_{\mathrm{LR}} = -\sin\theta \sum_{i\neq j} \frac{1}{|i-j|^\alpha}\sigma_{\mathrm{x}}^i\sigma_{\mathrm{x}}^j + \cos\theta\sum_{i=1}^N \sigma_{\mathrm{z}}^i. \tag{6}$$

在这种情况下，临界点的位置取决于幂律指数 α [76–78]: 这里我们考虑三个不同的取值 $\alpha = 1/2$、1、3，并选择 θ ，使其在每种情况下都位于临界点 [62] 。目标哈密顿量 (6) 中出现的相互作用使式 (2) 的 wQED-I 变分 Ansatz 成为这一问题的自然选择。此外，我们还将其与经过修改的 wQED-I 变分 Ansatz 进行比较：在该变体中，每一层内的 $W_{\mathrm{I}}(T_i, L_i)$ 被两个酉算符的乘积 $\prod_{l=1}^2 W_{\mathrm{I}}(T_l, L_l)$ 取代，同时选择参数 T_l、L_l，使得对于给定的距离范围 [79]，$\sum_l J_l e^{-|x_i-x_j|/L_l} \approx J_\alpha/|x_i-x_j|^\alpha$ 能够近似目标模型的幂律指数。如参考文献 [54] 所示，这种多指数相互作用可以通过多频拉曼激光器实现。结果总结于图3，其中 (a–c) 面板展示了保真度损失随层数变化的情况，

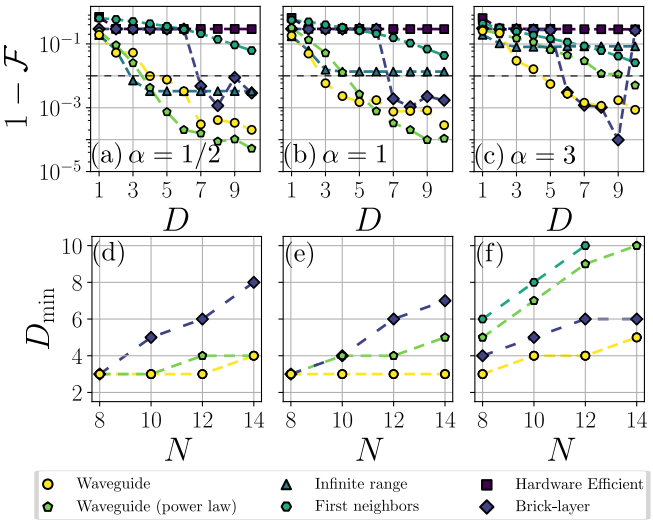


图3. (a-c) 对于幂律指数 α的若干取值，LRTFIM 的精确基态与采用不同 ans¨atz 得到的优化变分态之间的保真度损失 $1-\mathcal{F}$，随层数 D 的变化。系统规模为 $N = 14$ 个量子比特。(d-f) 对于不同的 α取值，达到超过 99% 保真度 $\mathcal{F}$ 所需的最小深度 D，随量子比特数 N 的变化。

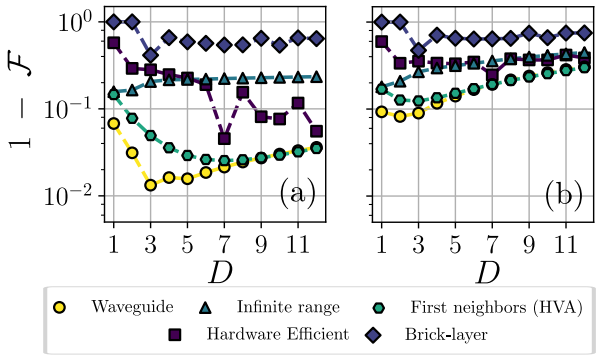


图 4. (a-b) 对于 $N = 12$ 个量子比特，退相干对 TFIM 精确基态与采用不同 ans¨atz 得到的优化变分态之间的保真度损失 $1-\mathcal{F}$ 的影响，随层数 D 的变化。单量子比特门和双量子比特门的错误概率分别为：(a) 中的 $p_1 = 10^{-5}$ 和 $p_2 = 5\times10^{-4}$，以及 (b) 中的 $p_1 = 10^{-4}$ 和 $p_2 = 5\times10^{-3}$。

对于 $N = 14$ 个量子比特，保真度损失是层数的函数；(d–f) 展示了在不同 N 下达到 99% 以上保真度所需的深度。主要结论是，与前述情况一样，即使对于作用范围更长的模型，wQED-I 试探态也能以更小（或相同）的电路深度达到目标保真度。然而，在这些模型中，当电路深度较大时，幂律波导量子电动力学拟设最终会优于指数型拟设。

噪声的影响。- 到目前为止，我们考虑的都是理想的无噪声情形。真实实验装置并非如此，波导模式相关的耗散、无序以及其他衰减通道都会引入误差。

鉴于波导量子电动力学平台 [37–53], 种类繁多，最相关误差的物理来源可能各不相同，为研究噪声的影响，我们采用文献 [6, 62]，中描述的平台无关误差模型。该模型假设每个单量子比特门（或多量子比特门）具有恒定的错误概率 $p_{1(2)}$ 。我们重点研究噪声对以式 (5) 中的横场伊辛模型为代价函数的变分量子本征求解器的影响，因为这种情况在数值上更容易处理。结果总结于图 4：图中展示了两种 $p_{1(2)}$ 取值下，保真度损失随层数的变化；每一对结果对应一个不同的面板。这些取值选自一些先进 NISQ 设备 [80, 81] 所呈现的量子门保真度范围。我们得出结论，在存在噪声时，保真度损失不会随着电路深度的增加而单调下降。所有试探态都如此，包括 wQED-I 变分 Ansatz。其原因是，增加层数会引入更多变分参数，在条件相同的情况下改善优化过程；但由此带来的精度提升最终会因施加更多量子门而产生的误差累积而丧失。在这种误差模型下，wQED-I 变分 Ansatz 的保真度损失最小。这主要是因为它在电路深度较小时表现更佳，而且每层的量子门数量少于其他试探态，从而减少了误差的引入。对于源自量子门控制不完善的误差，情况也同样如此；wQED 电路较小的深度也可能有助于降低这类误差。我们将针对各类特定实现 [37–53] 研究更精细的误差模型，留待未来开展。

结论与展望。- 总之，我们介绍了一种新型变分量子本征求解器试探态，它基于可在波导量子电动力学装置中实现的可调作用范围相互作用。我们证明，得益于这种可调性，与文献中其他结构固定的试探态相比，这种试探态能以更少的量子门和参数捕捉具有长程关联的相，因此可能对量子门误差不那么敏感。尽管波导量子电动力学在保真度方面仍落后于变分囚禁离子 [12, 26] 或超导量子模拟器 [6], , 但发射体与光子波导 [37–47],、微波电路 [48–52]或物质波 [53], 集成方面的实验进展迅速，加之本研究展示的潜力，使波导量子电动力学模拟器成为变分量子算法的有望候选方案。此外，我们提出的将相互作用范围用作变分参数的思路，也可扩展到其他能够实现此类可调作用范围相互作用的装置，例如囚禁离子 [82–87]或多模腔量子电动力学装置 [88]。展望未来，我们计划将研究结果扩展至高维模型 [89], , 在这类模型中也能实现可调的指数 [55, 90]和幂律相互作用 [91–95],; 此外，还将研究具有高维自旋的模型 [68, 96, 97], , 并设计基于波导量子电动力学相互作用的自适应试探态¨ [98–103] , 这也是变分量子计算领域的另一项活跃研究方向。

致谢

作者感谢 Proyecto Sin´ergico CAM 2020 Y2020/TCS-6545 (NanoQuCo-CM)、CSIC 量子技术研究平台 PTI-001，以及西班牙项目 PID2021-127968NB-I00 和 TED2021-130552B-C22 提供的支持。上述项目分别由 MCIN/AEI/10.13039/501100011033/FEDER、欧盟以及 MCIN/AEI/10.13039/501100011033 资助。The 作者还感谢加利西亚超级计算中心（CESGA），该中心提供了 FinisTerrae 超级计算机的使用权限，用于进行数值模拟。AGT 还感谢 BBVA 基金会提供的 2022 年莱昂纳多研究人员与文化创作者资助，并感谢 X. Zhang 对物理实现相关构想所进行的深入讨论，以及对稿件的审阅并提出批评意见。

[1] M. Cerezo, A. Arrasmith, R. Babbush, S. C. Benjamin, S. Endo, K. Fujii, J. R. McClean, K. Mitarai, X. Yuan, L. Cincio, and P. J. Coles, Nat. Phys. Rev. **3**, 625 (2021). [2] K. Bharti, A. Cervera-Lierta, T. H. Kyaw, T. Haug, S. Alperin-Lea, A. Anand, M. Degroote, H. Heimonen, J. S. Kottmann, T. Menke, W. K. Mok, S. Sim, L. C. Kwek, and A. Aspuru-Guzik, Rev. Mod. Phys. **94**, 015004 2022( ). [3] J. Preskill, Quantum **2**, 79 (2018). [4] J. Tilly, H. Chen, S. Cao, D. Picozzi, K. Setia, Y. Li, E. Grant, L. Wossnig, I. Rungger, G. H. Booth, and J. Tennyson, Physics Reports **986**, 1 (2022). [5] A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.- Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O'Brien, Nat. Commun. **5**, 4213 (2014). [6] A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, M. Takita, M. Brink, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, Nature **549**, 242 (2017). [7] G. A. Quantum, Science **369**, 1084 (2020). [8] J. Lee, W. J. Huggins, M. Head-Gordon, and K. B. Whaley, 《化学理论与计算杂志》**15**, 311 (2019). [9] Y. Matsuzawa and Y. Kurashige, 《化学理论与计算杂志》**16**, 944 (2020). [10] I. D. Kivlichan, N. Wiebe, R. Babbush, and A. Aspuru-Guzik, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **50**, 305301 (2017). [11] K. Setia, S. Bravyi, A. Mezzacapo, and J. D. Whitfield, Phys. Rev. Res. **1**, 033033 (2019). [12] C. Kokail, C. Maier, R. van Bijnen, T. Brydges, M. K. Joshi, P. Jurcevic, C. A. Muschik, P. Silvi, R. Blatt, C. F. Roos, and P. Zoller, Nature **569**, 355 (2019). [13] A. Yamamoto, Phys. Rev. D **104**, 014506 (2021). [14] R. Irmejs, M. C. Banuls, and J. I. Cirac, arXiv: 2206.08909 (2022), 10.48550/arxiv.2206.08909. [15] D. Paulson, L. Dellantonio, J. F. Haase, A. Celi, A. Kan, A. Jena, C. Kokail, R. Van Bijnen, K. Jansen, P. Zoller, and C. A. Muschik, PRX Quantum **2**, 030334 (2021). [16] A. N. Ciavarella and I. A. Chernyshev, Phys. Rev. D **105**, 074504 (2022). [17] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, arXiv: 1411.4028 (2014), 10.48550/arxiv.1411.4028. [18] C. Y.-Y. Lin and Y. Zhu, arXiv: 1601.01744 (2016), 10.48550/arxiv.1601.01744. [19] N. Moll, P. Barkoutsos, L. S. Bishop, J. M. Chow, A. Cross, D. J. Egger, S. Filipp, A. Fuhrer, J. M. Gambetta, M. Ganzhorn, A. Kandala, A. Mezzacapo, P. M¨uller, W. Riess, G. Salis, J. Smolin, I. Tavernelli, 以及 K. Temme，量子科学与技术 3，030503（2018）。[20] B. X. Wang 和 C. Y. Zhao，《物理评论A》98，023808（2018）。[21] N. Lacroix、C. Hellings、C. K. Andersen、A. Di Paolo、A. Remm、S. Lazar、S. Krinner、G. J. Norris、M. Gabu-reac、J. Heinsoo、A. Blais、C. Eichler 和 A. Wallraff，PRX Quantum 1，020304（2020）。[22] M. P. Harrigan、K. J. Sung、M. Neeley、K. J. Satzinger、F. Arute、K. Arya、J. Atalaya、J. C. Bardin、R. Barends、S. Boixo、M. Broughton、B. B. Buck-ley、D. A. Buell、B. Burkett、N. Bushnell、Y. Chen、Z. Chen、Ben Chiaro、R. Collins、W. Courtney、S. De-mura、A. Dunsworth、D. Eppens、A. Fowler、B. Foxen、C. Gidney、M. Giustina、R. Graff、S. Habegger、A. Ho、S. Hong、T. Huang、L. B. Ioffe、S. V. Isakov、E. Jeffrey、Z. Jiang、C. J ones、D. Kafri、K. Kechedzhi、J. Kelly、S. Kim、P. V. Kli mov、A. N. Korotkov、F. Kostritsa、D. Landhuis、P. Laptev、M. Lindmark、M. Leib、O. Mar-tin、J. M. Martinis、J. R. McClean、M. McEwen、A. Megrant、X. Mi、M. Mohseni、W. Mruczkiewicz、J. Mutus、O. Naaman、C. Neill、F. Neukart、M. Y. Niu、T. E. O'Brien、B. O'Gorman、E. Ostby、A. Petukhov、H. Putterman、C. Quintana、P. Roushan、N. C. Rubin、D. Sank、A. Skolik、V. Smelyanskiy、D. Strain、M. Streif、M. Szalay、A. Vainsencher、T. White、Z. J. Yao、P. Yeh、A. Zalcman、L. Zhou、H. Neven、D. Bacon、E. Lucero、E. Farhi 和 R. Babbush，《自然·物理》17，332（2021）。[23] V. Havl´ıˇcek、A. D. C´orcoles、K. Temme、A. W. Harrow、A. Kandala、J. M. Chow 和 J. M. Gambetta，《自然》567，209（2019）。[24] S. Johri、S. Debnath、A. Mocherla、A. Singk、A. Prakash、J. Kim 和 I. Kerenidis，NPJ《量子信息》7，1（2021）。[25] B. Koczor、S. Endo、T. Jones、Y. Matsuzaki 和 S. C. Benjamin，《新物理学杂志》22，083038（2020）。[26] R. Kaubruegger、D. V. Vasilyev、M. Schulte、K. Ham-merer 和 P. Zoller，《物理评论X》11，041045（2021）。[27] Z. Ma、P. Gokhale、T. X. Zheng、S. Zhou、X. Yu、L. Jiang、P. Maurer 和 F. T. Chong，《2021年IEEE量子计算与工程国际会议论文集》，419（2021）。[28] J. L. Beckey、M. Cerezo、A. Sone 和 P. J. Coles，《物理评论研究》4，013083（2022）。[29] J. R. McClean、S. Boixo、V. N. Smelyanskiy、R. Bab-bush 和 H. Neven，《自然·通讯》9，1（2018）。[30] Z. Holmes、K. Sharma、M. Cerezo 和 P. J. Coles，《物理评论X：量子》3，010313（2022）。[31] D. Wecker、M. B. Hastings 和 M. Troyer，《物理评论

A 92，42303（2015）。[32] J. M. Reiner、F. Wilhelm-Mauch、G. Sch¨on 和 M. Marthaler，量子科学与技术 4，035005（2019）。[33] G. Verdon、M. Broughton、J. R. McClean、K. J. Sung、R. Babbush、Z. Jiang、H. Neven 和 M. Mohseni，arXiv: 1907.05415（2019），10.48550/arxiv.1907.05415。[34] A. A. Mele、G. B. Mbeng、G. E. Santoro、M. Collura 和 P. Torta，《物理评论A》106，L060401（2022）。[35] R. Wiersema、C. Zhou、Y. De Sereville、J. F. Car-rasquilla、Y. B. Kim 和 H. Yuen，PRX Quantum 1，020319（2020）。[36] G. Pagano、A. Bapat、P. Becker、K. S. Collins、A. De、P. W. Hess、H. B. Kaplan、A. Kyprianidis、W. L. Tan、C. Baldwin、L. T. Brady、A. Deshpande、F. Liu、S. Jor-dan、A. V. Gorshkov 和 C. Monroe，《美国国家科学院院刊》117，25396（2020）。[37] A. Goban、C.-L. Hung、S.-P. Yu、J. D. Hood、J. A. Mu-niz、J. H. Lee、M. J. Martin、A. C. McClung、K. S. Choi、D. E. Chang、O. Painter 和 H. J. Kimblemblrm，《自然·通讯》5，3808（2014）。[38] A. Goban、C.-L. Hung、J. D. Hood、S.-P. Yu、J. A. Mu-niz、O. Painter 和 H. J. Kimble，《物理评论快报》115，63601（2015）。[39] J. D. Hood、A. Goban、A. Asenjo-Garcia、M. Lu、S.-P. Yu、D. E. Chang 和 H. J. Kimble，《美国国家科学院院刊》113，10507（2016）。[40] P. Samutpraphoot、P. L. Ocola、H. Bernien、C. Senko、V. Vuleti´c 和 M. D. Lukin，《物理评论快报》124，063602（2020）。[41] A. Laucht、S. P¨utz、T. G¨unthner、N. Hauke、R. Saive、S. Fr´ed´erick、M. Bichler、M.-C. Amann、A. W. Holleit-ner、M. Kaniber 和 J. J. Finley，《物理评论X》2，11014（2012）。[42] R. E. Evans、M. K. Bhaskar、D. D. Sukachev、C. T. Nguyen、A. Sipahigil、M. J. Burek、B. Machielse、G. H. Zhang、A. S. Zibrov、E. Bielejec 等，《科学》362，662（2018）。[43] M. H. Appel、A. Tiranov、A. Javadi、M. C. L¨obl、Y. Wang、S. Scholz、A. D. Wieck、A. Ludwig、R. J. War-burton 和 P. Lodahl，《物理评论快报》126，013602（2021）。[44] A. Tiranov、V. Angelopoulou、C. J. van Diepen、B. Schrinski、O. A. D. Sandberg、Y. Wang、L. Mi-dolo、S. Scholz、A. D. Wieck、A. Ludwig、A. S. Sørensen 和 P. Lodahl，arXiv: 2210.02439（2022），10.48550/arxiv.2210.02439。[45] B. MacHielse、S. Bogdanovic、S. Meesala、S. Gauthier、M. J. Burek、G. Joe、M. Chalupnik、Y. I. Sohn、J. Holz-grafe、R. E. Evans、C. Chia、H. Atikian、M. K. Bhaskar、D. D. Sukachev、L. Shao、S. Maity、M. D. Lukin 和 M. Lonˇcar，《物理评论X》9，031022（2019）。[46] A. E. Rugar、C. Dory、S. Aghaeimeibodi、H. Lu、S. Sun、S. D. Mishra、Z. X. Shen、N. A. Melosh 和 J. Vuˇckovi´c，ACS Photonics 7，2356（2020）。[47] A. E. Rugar、S. Aghaeimeibodi、D. Riedel、C. Dory、H. Lu、P. J. McQuade、Z. X. Shen、N. A. Melosh 和 J. Vuˇckovi´c，《物理评论X》11，031021（2021）。[48] Y. Liu 和 A. A. Houck，《自然·物理》13，48（2017）。[49] M. Mirhosseini、E. Kim、V. S. Ferreira、M. Kalaee、A. Sipahigil、A. J. Keller 和 O. Painter，《自然·通讯》9，1（2018）。[50] N. M. Sundaresan、R. Lundgren、G. Zhu、A. V. Gor-shkov 和 A. A. Houck，《物理评论X》9，011021（2019）。

[51] M. Scigliuzzo、G. Calaj`o、F. Ciccarello、D. Perez Lozano、A. Bengtsson、P. Scarlino、A. Wallraff、D. Chang、P. Delsing、and S. Gasparinetti，《物理评论X》12, 031036 2022( )。[52] X. Zhang、E. Kim、D. K. Mark、S. Choi、and O. Painter，《科学》379, 278 (2023)。[53] L. Krinner、M. Stewart、A. Pazmino、J. Kwon、and D. Schneble，《自然》559, 589 (2018)。[54] J. S. Douglas、H. Habibian、C.-L. Hung、A. V. Gorshkov、H. J. Kimble、and D. E. Chang，《自然·光子学》9, 326 (2015)。[55] A. Gonz´alez-Tudela、C.-L. Hung、D. Chang、J. Cirac、and H. Kimble，《自然·光子学》9, 320 (2015)。[56] C.-L. Hung、A. Gonz´alez-Tudela、J. Ignacio Cirac、and H. Kimble，《美国国家科学院院刊》113 (2016)、10.1073/pnas.1603777113。[57] J. D. Joannopoulos、S. G. Johnson、J. N. Winn、and R. D. Meade，*Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (Second Edition)* 2011 ( )。

[58] D. Chang、J. Douglas、A. Gonz´alez-Tudela、C.-L. Hung、and H. Kimble，Rev. Mod. Phys. 90、031002 (2018)。[59] V. P. Bykov，《苏联量子电子学杂志》4, 861 1975( )。[60] S. John and J. Wang，《物理评论快报》64, 2418 (1990)。[61] G. Kurizki，《物理评论A》42, 2915 (1990)。[62] “在本补充材料中，我们将进一步详细介绍：i) 波导介导的相互作用；ii) 正文中使用的拟设和优化算法；iii) 误差建模。”[63] C. Bravo-Prieto、J. Lumbreras-Zarapico、L. Tagliacozzo、and J. I. Latorre，《Quantum》4, 272 (2020)。[64] B. Jobst、A. Smith、and F. Pollmann，《物理评论研究》4, 033118 (2022)。[65] S. Roca-Jerat、T. Sancho-Lorente、J. Rom´an- Roche、a nd D. Zueco，arXiv:2301.04671 (2023)、10.48550/arxiv.2301.04671。[66] A. Garcia-Saez and J. I. Latorre，arXiv.1806.02287 (2018)、10.48550/arxiv.1806.02287。[67] H. Ritsch、P. Domokos、F. Brennecke、and T. Esslinger，Rev. Mod. Phys. 85、553 (2013)。[68] E. J. Davis、G. Bentsen、L. Homeier、T. Li、and M. H. Schleier-Smith，《物理评论快报》122, 010405 (2019)。[69] A. Periwal、E. S. Cooper、P. Kunkel、J. F. Wienand、E. J. Davis、and M. Schleier-Smith，arXiv (2021)。[70] Z. Li、B. Braverman、S. Colombo、C. Shu、A. Kawasaki、A. F. Adiyatullin、E. Pedrozo-Pe˜nafiel、E. Mendez、and V. Vuleti´c，PRX Quantum 3、020308 (2022)。[71] J. Ramette、J. Sinclair、Z. Vendeiro、A. Rudelis、M. Cetina、and V. Vuleti´c、PRX Quantum 3、010344 (2022)。[72] G. P. Greve、C. Luo、B. Wu、and J. K. Thompson，《自然》610, 472 (2022)。[73] O. Hosten、N. J. Engelsen、R. Krishnakumar、and M. A. Kasevich，《自然》529, 505 (2016)。[74] A. Langari，《物理评论 B》58, 14467 (1998)。[75] M. Larocca、N. Ju、D. Garc´ıa-Mart´ın、P. J. Coles、and M. Cerezo，arXiv:2109.11676 (2021)、10.48550/arxiv.2109.11676。[76] D. Ruelle，《数学物理通讯》9, 267 1968( )。[77] F. J. Dyson，《数学物理通讯》12, 91 (1969)。[78] A. Dutta and J. K. Bhattacharjee，《物理评论 B》64, 184106 2001( )。

[79] 这些参数总可以通过用指数函数拟合幂律来求得 [104]。[80] “IonQ”，。[81] “IBM Quantum”，。[82] D. Porras and J. I. Cirac，《物理评论快报》92, 207901 (2004)。[83] P. Nevado and D. Porras，《物理评论A》93, 13625 (2016)。[84] P. Richerme, Z.-X. Gong, A. Lee, C. Senko, J. Smith, M. Foss-Feig, S. Michalakis, A. V. Gorshkov, and C. Monroe，《自然》511, 198 (2014)。[85] P. Jurcevic, B. P. Lanyon, P. Hauke, C. Hempel, P. Zoller, R. Blatt, and C. F. Roos，《自然》511, 202 (2014)。[86] M. K. Joshi, A. Elben, B. Vermersch, T. Brydges, C. Maier, P. Zoller, R. Blatt, and C. F. Roos，《物理评论快报》124, 240505 (2020)。[87] C. Monroe, W. C. Ca mpbell, L. M. Duan, Z. X. Gong, A. V. Gorshkov, P. W. Hess, R. Islam, K. Kim, N. M. Linke, G. Pagano, P. Richerme, C. Senko, and N. Y. Yao，Rev. Mod. Phys. 93, 025001 (2021)。[88] V. D. Vaidya, Y. Guo, R. M. Kroeze, K. E. Ballantine, A. J. Koll´ar, J. Keeling, and B. L. Lev，《物理评论X》8, 011002 (2018)。[89] T. Armon, S. Ashkenazi, G. Garc´ıa-Moreno, A. Gonz´alez-Tudela, and E. Zohar，《物理评论快报》127, 250501 (2021)。[90] A. Gonz´alez-Tudela and F. Galve，ACS Photonics 6, 221 2018( )。[91] J. Perczel and M. D. Lukin，《物理评论A》101, 033822 (2020)。[92] A. Gonz´alez-Tudela and J. Cirac，《物理评论A》97 (2018), 10.1103/PhysRevA.97.043831。[93] J. Redondo-Yuste, M. Blanco De Paz, P. A. Huidobro, and A. Gonz´alez-Tudela，《新物理学杂志》23, 103018 2021( )。[94] I. n. Garc´ı a-Elcano, A. Gonz´alez-Tudela, and J. Bravo- Abad，《物理评论快报》125, 163602 (2020)。[95] E. P. Navarro-Bar´on, H. Vinck-Posada, and A. Gonz´alez-Tudela，ACS Photonics 8, 3209 (2021)。[96] A. P. Orioli, J. K. Thompson, and A. M. Rey，《物理评论X》12, 011054 (2021)。[97] C. Tabares, E. Zohar, and A. Gonz´alez-Tudela，《物理评论A》106 (2022), 10.1103/PhysRevA.106.033705。[98] L. Zhu, H. L. Tang, G. S. Barron, F. A. Calderon- Vargas, N. J. Mayhall, E. Barnes, and S. E. Economou，《物理评论研究》4, 033029 (2022)。[99] H. R. Grimsley, S. E. Economou, E. Barnes, and N. J. Mayhall，《自然·通讯》10, 1 (2019)。[100] Y. X. Yao, N. Gomes, F. Zhang, C. Z. Wang, K. M. Ho, T. Iadecola, and P. P. Orth, PRX Quantum 2, 030307 (2021)。[101] X. H. H. Zhang and H. U. Baranger，《物理评论A》103, 033711 2021( )。[102] D. Claudino, J. Wright, A. J. McCaskey, and T. S. Humble, Frontiers in Chemistry 8, 1152 (2020)。[103] H. L. Tang, V. O. Shkolnikov, G. S. Barron, H. R. Grim- sley, N. J. Mayhall, E. Barnes, and S. E. Economou，PRX Quantum 2, 020310 (2021)。[104] B. Pirvu, V. Murg, J. I. Cirac, and F. Verstraete，《新物理学杂志》12, 025012 (2010)。[105] S. Sim, P. D. Johnson, A. Aspuru-Guzik, S. Sim, P. D. Johnson, and A. Aspuru-Guzik，Advanced Quantum Technologies》**2**，1900070（2019）。

[106] K. Nakaji 和 N. Yamamoto，《Quantum》**5**，434（2021）。[107] G. Mussardo，*Statistical field theory: an introduction to exactly solved models in statistical physics*，由 O. U. Press 编辑。[108] T. Koffel、M. Lewenstein 和 L. Tagliacozzo，《物理评论快报》**109**，267203（2012）。[109] J. M. Arrazola、S. Jahangiri、A. Delgado、J. Ceroni、J. Izaac、A. Sz´ava、U. Azad、R. A. Lang、Z. Niu、O. Di Matteo、R. Moyard、J. Soni、M. Schuld、R. A. Vargas-Hern´andez、T. Tamayo-Mendoza、C. Y.-Y. Lin、A. Aspuru-Guzik 和 N. Killoran，arXiv: 2111.09967（2021），10.48550/arxiv.2111.09967。[110] A. Paszke、S. Gross、F. Massa、A. Lerer、J. Bradbury、G. Chanan、T. Killeen、Z. Lin、N. Gimelshein、L. Antiga、A. Desmaison、A. K¨opf、E. Yang、Z. DeVito、M. Raison、A. Tejani、S. Chilamkurthy、B. Steiner、L. Fang、J. Bai 和 S. Chintala，《神经信息处理系统进展》**32**（2019），10.48550/arxiv.1912.01703。[111] D. P. Kingma 和 J. L. Ba，第三届国际学习表征会议（ICLR 2015）会议论文集（2014），10.48550/arxiv.1412.6980。[112] S. Barison、F. Vicentini、I. Cirac 和 G. Carleo，《物理评论研究》**4**，043161（2022）。[113] S. Wang、E. Fontana、M. Cerezo、K. Sharma、A. Sone、L. Cincio 和 P. J. Coles，《自然·通讯》**12**，1（2021）。

补充材料：变分波导量子电动力学模拟器

在本补充材料中，我们提供更多细节，以支持正文中呈现的结果。在 SM1 节中，我们回顾波导模式具有带隙时光子介导相互作用可调控性的物理起源。随后，在 SM2 节中，我们概述变分量子本征求解器算法的关键步骤（ SM2 A），介绍所考虑目标模型的性质（SM2 B），说明文献中通常采用的不同 ans¨atze 的结构（SM2 C），详细介绍我们用于获得正文结果的优化方案（SM2 D），并讨论其他可用于评估我们结果的评价指标（SM2 E）。最后，在 SM3 节中，我们讨论用于生成正文图3的误差模型的细节。另请注意，复现本文结果所需的所有代码均可在 https://github.com/ cristiantlopez/Variational-Waveguide-QED-Simulators 获取。

SM1. 光子　　带隙波导量子电动力学中的光子介导相互作用　　S

光子带隙波导中的光子介导相互作用已在其他研究中得到广泛探讨 [54–56]。因此，我们在此仅回顾这些相互作用如何产生，旨在帮助读者直观理解其可调性的来源。

考虑一个如正文图 1(a)所示的系统，其中 N_e 个发射体与具有能量色散关系 ω_k的光子晶体波导相互作用。在这种情况下，光与物质相互作用哈密顿量由三部分组成。首先，光子部分为

$$H_{\mathrm{B}} = \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k \,, \tag{SM1}$$

其中 $a_k^{(\dagger)}$ 是动量为 k的波导光子的湮灭（产生）算符。其次是发射体哈密顿量 H_{S}，其形式取决于具体的能级结构。目前我们不写出其显式形式，只假设这些发射体至少具有一个光学跃迁，该跃迁通过一般的偶极算符 $\mathcal{O}_i$ 与波导模式耦合，且所有发射体的有效频率 $\omega_{\mathcal{O}}$ 相同。在这种情况下，总哈密顿量的最后一项是光与物质耦合哈密顿量，可写为

$$H_{\mathrm{I}}(t) = \sum_{k,i} g_k e^{-ikx_i} a_k^\dagger \mathcal{O}_i e^{i(\omega_k-\omega_{\mathcal{O}})t} + \mathrm{H.c}\,, \tag{SM2}$$

其中， g_k 是第 i个发射体与具有 k动量的光子之间的单光子耦合强度。这里，我们隐含地假设耦合是局域的，因此光-物质耦合中唯一出现的相位是传播相位 e^{-ikx_i}；同时，耦合强度远小于光学跃迁频率，因此我们只保留守恒激发数的项。对于我们感兴趣的实现而言，这两种近似都很合理。

本文关注这样一种情形：光子场可以被消去，并在发射体上诱导出有效动力学。假设耦合较弱且光子浴无记忆（玻恩-马尔可夫近似），相互作用绘景中的有效发射体动力学为

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -i\left[\sum_{i,j} J_{i,j}\mathcal{O}_i^\dagger \mathcal{O}_j, \rho\right] + \sum_{i,j}\frac{\gamma_{i,j}}{2}\left(2\mathcal{O}_j\rho\mathcal{O}_i^\dagger - \mathcal{O}_i\mathcal{O}_j^\dagger\rho - \rho\mathcal{O}_i\mathcal{O}_j^\dagger\right), \tag{SM3}$$

其中，光子介导相互作用为 [54–56]

$$J_{i,j} - i\frac{\gamma_{i,j}}{2} = \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\frac{|g_k|^2 e^{ik(x_i-x_j)}}{\omega_{\mathcal{O}} - \omega_k + i0^+}\,, \tag{SM4}$$

并取决于光-物质哈密顿量（SM2）中出现的失谐 $\omega_{\mathcal{O}} - \omega_k$。由此可见，若$\omega_{\mathcal{O}}$ 处于 ω_k的光子带隙中，即对于任意 k均有 $\omega_{\mathcal{O}} \neq \omega_k$，则非酉部分会抵消，即$\gamma_{i,\ j} \equiv 0$。此外，若假设在带边 $\omega_k \approx \omega_c + A$附近有$k - k_c(^2,)$，则可以证明$J_{i,\ j}$ 呈指数局域

$$J_{i,j} = Je^{-|x_i-x_j|/L}\,, \tag{SM5}$$

其局域化长度为 $L = \sqrt{A}/(\omega_c - \overline{\omega_{\mathcal{O}}})$，取决于带边与偶极算符频率之间的相对失谐，以及 $J \propto |g_{k_{\mathcal{O}}}|^2$。这里，我们还吸收了相对相 $e^{ik_c|x_i-x_j|}$，这些相可通过适当放置发射体进行修正。现在，让我们说明正文中考虑的不同情况：

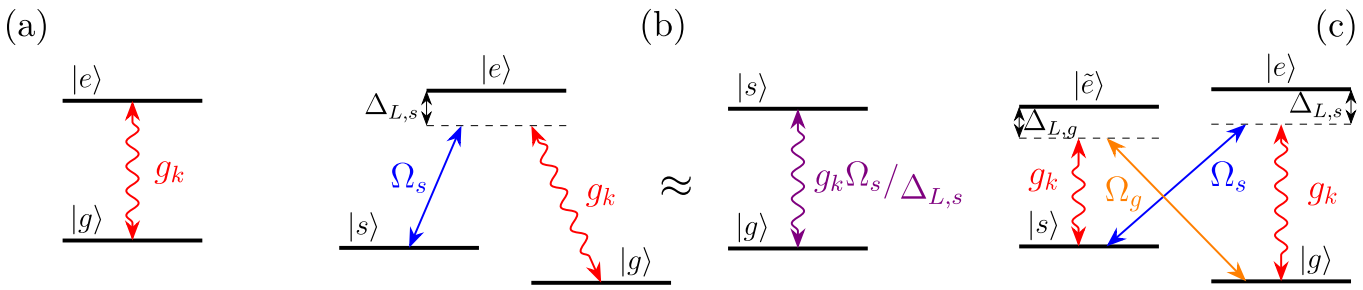


图 SM1. 不同发射体的能级、与光子模式的耦合，以及用于获得正文中所讨论的有效哈密顿量的激光驱动跃迁示意图。(a) 基态与激发态 $|g\rangle$和 $|e\rangle$ 之间的跃迁可与光子模式 k 耦合；对该模式进行绝热消去后，可得到式 SM6 所示的有效哈密顿量。(b) 若基态流形中的另一个能级 $|s\rangle$以振幅 Ω_s 和失谐 $\Delta_{L,\,s}$ 与激发态 $|e\rangle$耦合，并假设 $|\Omega_s| \ll \Delta_{L,\,s}$（即激光远失谐），则可绝热消去激发能级，从而得到发射体之间的有效光介导相互作用，其形式与图 SM1(a) 所示相同，但其振幅可动态调节，参见式 SM8。(c) 此外，若另一个激发态 $|\tilde{e}\rangle$（通过 $|\tilde{e}\rangle \leftrightarrow |s\rangle$ 跃迁与相同的光子模式 a_k 耦合）经由振幅为 Ω_g 、失谐为 $\Delta_{L,\,g}$的拉曼激光与基态 $|g\rangle$ 耦合，则绝热消去激发态后会得到发射体之间的有效伊辛型相互作用，见式 SM10。

• 首先，最简单的情况是只有一个基态（g）和一个激发态（e）的二能级发射体，如图 SM1(a) 所示。在这种情况下，发射体的偶极算符为 $\mathcal{O}_i = \sigma^i_{ge}$，而 $\omega_{\mathcal{O}} = \omega_e - \omega_g$ 仅为基态与激发态之间的能量差。因此，有效相互作用哈密顿量会在发射体的基态与激发态之间引发自旋交换激发：

$$H_{\mathrm{XX}} = J \sum_{i,j} e^{-|x_i - x_j|/L} \sigma^i_{\mathrm{eg}} \sigma^j_{\mathrm{ge}}\,, \tag{SM6}$$

文献中有时将其称为 XX相互作用。若要开启或关闭相互作用J，需要一种能够切换与波导模式之间耦合的机制；而若要调节 L，则需要对波导或发射体的频率进行动态控制。

• 若发射体具有一个额外的基态 s，并通过强度为 Ω_s 、频率为 $\omega_{L,\,s}$ 的拉曼跃迁与激发态 e相连，如图 SM1(b) 所示，则可以进一步调节其动力学。具体而言，若拉曼激光相对于光学激发态的失谐 $\Delta_{L,\,s} = \omega_e - \omega_{L,\,s} - \omega_s$远大于强度 Ω_s，则激发态仅被虚占据，因此可得到如下重整化光-物质相互作用哈密顿量：

$$H_I \approx \sum_{k,i} g_k \frac{\Omega_s}{2\Delta_{L,s}} e^{-ikx_i} a_k^\dagger \sigma^i_{gs} e^{i(\omega_k - \omega_s - \omega_{L,s} + \omega_g)t} + \mathrm{H.c}\,, \tag{SM7}$$

其中，有效偶极算符为 $\mathcal{O}_i = \sigma^i_{gs}$。这里可以看到两个有趣的结果：一方面，有效光-物质耦合经过 $\Omega_s/2\Delta_{L,\,s}$重整化，从而能够将其开启或关闭。另一方面，激光的频率出现在相互作用哈密顿量中，因此能够控制相互作用的有效频率 $\omega_{\mathcal{O}} = \omega_L + \omega_s - \omega_g$。因此，在这种情况下，光子介导相互作用的形式在定性上类似于式 (SM6)：

$$H_{\mathrm{XX}} = \tilde{J} \sum_{i,j} e^{-|x_i - x_j|/\tilde{L}} \sigma^i_{sg} \sigma^j_{gs}\,, \tag{SM8}$$

˜ ˜但现在自旋交换发生在基态能级 $\{g, s\}$之间，并且 J 和 L 都可以动态调节。

•如果考虑到另一个激发态能级（$\tilde{e}$）通过附加态能级 s与相同的波导模式 a_k 耦合，如图 SM1(c) 所示，那么就可以定性地改变相互作用的形式，正如文献 [54, 56] 所示。为此，需要增加一束拉曼激光，将基态g 与额外的激发态 $\tilde{e}$连接起来，如正文中的图 1(a) 所示。将其记为 Ω_g 和$\omega_{L,\,g}$

振幅和频率，并假设它满足与另一个激发态相同的条件，使其能够被绝热地消去，则可得到以下重整化后的光与物质相互作用哈密顿量：

$$H_I \approx \sum_{k,i} g_k e^{-ikx_i} a_k^\dagger \left(\frac{\Omega_s}{2\Delta_{L,s}} \sigma_{gs}^i e^{i(\omega_k - \omega_s - \omega_{L,s} + \omega_g)t} + \frac{\Omega_g}{2\Delta_{L,g}} \sigma_{sg}^i e^{i(\omega_k + \omega_s - \omega_{L,g} - \omega_g)t} \right) + \text{H.c.} \tag{SM9}$$

固定 $2(\omega_g - \omega_s) = \omega_{L,s} - \omega_{L,g}$ 和 $\Omega_s/\Delta_{L,s} = \Omega_g/\Delta_{L,g}$后，可得与光子浴耦合的有效偶极算符为 $\mathcal{O}_i = \sigma_{gs}^i + \sigma_{sg}^i = 2\sigma_x^i$，即 x-泡利矩阵，而 $\omega_{\mathcal{O}} = \omega_s + \omega_{L,s} + \omega_g$。因此，对光子进行绝热消除后，可得到伊辛型相互作用

$$H_{\text{Ising}} = J \sum_{i,j} e^{-|x_i - x_j|/L} \sigma_x^i \sigma_x^j , \tag{SM10}$$

其 J 和 L也可调节。

- 最后，考虑拉曼激光器并非只有单一频率，而是包含多个边带，例如 $\Omega_{g/s} e^{i\omega_{L,g/s} t} \to \Omega_{g/s} \sum_\alpha c_\alpha e^{i\delta_\alpha t}$。如文献 [54, 56], 所示，每个边带都会产生一个具有不同局域化长度 L_α 和不同强度 J_α的束缚态，这些性质取决于边带的权重和频率 $\{\delta_\alpha, c_\alpha\}$。因此，我们将得到如下形式的哈密顿量

$$H_{\text{R}} = \sum_{i,j} \left(\sum_\alpha J_\alpha e^{-|x_i - x_j|/L_\alpha} \right) \mathcal{O}_i^\dagger \mathcal{O}_j , \tag{SM11}$$

具体的算符 $\mathcal{O}_i$ 取决于所选择的拉曼构型。这种多指数行为很有意思，因为正如参考文献 [54], 所指出的，通过叠加指数项可以得到有效的幂律行为。事实上，存在一些构造性算法 [104] ，可以给出所需的 $\{J_\alpha, L_\alpha\}$ ，以模拟幂律依赖：

$$\sum_\alpha J_\alpha e^{-|x_i - x_j|/L_\alpha} \approx \frac{J}{|x_i - x_j|^\alpha} . \tag{SM12}$$

在正文中，我们使用其中一种算法，来模拟图 4 所研究模型中相互作用的幂律依赖。

SM2. 变分量子本征求解器 ¨与固定结构试探态 E

A. 变分量子本征求解器关键步骤概要

变分量子算法将问题编码为一个代价函数，其最小值对应于该问题的解。通常，代价函数的形式为

$$C_{\rho,H}(\boldsymbol{\Theta}) = \text{Tr}\left[H U(\boldsymbol{\Theta}) \rho U(\boldsymbol{\Theta})^\dagger \right] , \tag{SM13}$$

其中， ρ 是输入的 n–量子比特状态， H 是厄米算符， $U(\boldsymbol{\Theta})$是由可训练参数组 $\boldsymbol{\Theta}$参数化的量子电路。代价函数$C_{\rho,H}(\boldsymbol{\Theta})$的值及其导数均可通过量子计算机计算，然后输入经典优化器以求解该问题：

$$(\boldsymbol{\Theta}_{\text{opt}}) = \text{argmin}_{\boldsymbol{\Theta}} C_{\rho,H}(\boldsymbol{\Theta}) . \tag{SM14}$$

当算符 H 取为特定系统的哈密顿量时，上述算法称为变分量子本征求解器（VQE） [5], ，最优参数组 $\boldsymbol{\Theta}_{\text{opt}}$ 可得到该系统基态的变分近似$\rho(\boldsymbol{\Theta}_{\text{opt}}) = U(\boldsymbol{\Theta}_{\text{opt}}) \rho U(\boldsymbol{\Theta}_{\text{opt}})^\dagger$。考虑到量子线路的（理想）输出是纯态 $|\Psi(\boldsymbol{\Theta})\rangle$，代价函数变为：

$$C_{\Psi,H}(\boldsymbol{\Theta}) := \langle \Psi(\boldsymbol{\Theta}) | H | \Psi(\boldsymbol{\Theta}) \rangle , \tag{SM15}$$

它对应于变分态的能量。

最优参数 $\boldsymbol{\Theta}_{\text{opt}}$ 能否很好地近似优化任务的解，取决于多种因素：首先，必须选择合适的 H。在变分量子本征求解器中， H 就是我们要寻找其基态的哈密顿量；但在其他算法中， H 有多种选择，因此还需考虑其他因素（例如算符 H 在量子计算机上是否易于测量）。其次，必须选择足够有表达能力的试探态 $U(\boldsymbol{\Theta})$，以生成接近问题解的状态。通常，这些试探态写作

$$U\left(\boldsymbol{\Theta}\right)=\prod_{i=1}^{D}\prod_{j=1}^{N}R_{i}^{j}(\theta_{j}^{i})W_{i}\left(\boldsymbol{\phi}_{i}\right)\,, \tag{SM16}$$

其中，量子线路由 D 层构成，每层包含一组单量子比特旋转门 $R_i^j = e^{-i\theta_i^j V^j}$（带有 $V^j \in \{\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z\}$ 一个泡利矩阵）和一个纠缠门 W_i（$\boldsymbol{\phi}_i$）。请注意，我们允许这些纠缠门依赖于参数，因为在本研究讨论的波导试探态中，用它们来纠缠量子比特时，这一点至关重要，其中 $\boldsymbol{\phi}_i = (T_i,\ L_i)$。不过，这些量子门仍可以与参数无关，例如 CZ门或 CNOT 门。

因此，要使用变分量子算法成功求得问题的解，参数化电路需要生成一个尽可能接近使代价函数最小化的酉算符。当对问题的解没有任何先验知识时，使用表达能力强的试探态可以最大程度地提高出现这种情况的可能性；也就是说，这种试探态能够以尽可能完整且均匀的方式探索酉算符空间（或者等价地，探索由量子电路输出所生成的状态的希尔伯特空间）。因此，试探态的表达能力（定义为其均匀探索问题希尔伯特空间的程度）通常通过比较此类量子电路生成的状态分布与 Haar随机态的均匀系综来量化 [105, 106]

$$A^{t}(C)=\int_{\text{Haar}}\left(|\psi\rangle\left\langle\psi\right|\right)^{\otimes t}\,\mathrm{d}\psi-\int_{\Theta}\left(|\psi_{\theta}\rangle\left\langle\psi_{\theta}\right|\right)^{\otimes t}\,\mathrm{d}\theta\,, \tag{SM17}$$

其中，$\int_{\text{Haar}}$ 表示对按 Haar 测度分布的状态进行积分， C 是我们关注的参数化量子电路，而 $|\psi_\theta\rangle$ 是由参数为 $\theta \in \Theta$ 的试探态生成的状态。由于对于 $A^t(C)$，范数较小的试探态会更接近任意状态，因此我们称其具有更高的表达能力。

然而，近期研究发现，设计变分量子算法时，最大化试探态的表达能力并非唯一需要考虑的因素。首先，理论研究表明，如果试探态构成 2-设计，那么其代价函数的梯度会随着量子比特数量的增加而呈指数级消失 [29]；后续研究则将这些结果推广到任意试探态，表明表达能力极强的量子电路会呈现更平坦的代价函数景观 [30]。这种情况称为贫瘠高原问题，这清楚地表明，选择合适的试探态是变分量子算法迈向实际应用的关键步骤，有助于避免训练问题并获得准确的最终结果。

B. 本文所研究的量子临界自旋模型概述

我们首先考虑 XXZ模型 [74]

$$H_{\text{XXZ}}=\sum_{i}\left(\sigma_{\text{x}}^{i}\sigma_{\text{x}}^{i+1}+\sigma_{\text{y}}^{i}\sigma_{\text{y}}^{i+1}\right)-\Delta\sum_{i}\sigma_{\text{z}}^{i}\sigma_{\text{z}}^{i+1} \tag{SM18}$$

在其 $SU(2)$ 对称铁磁点 $\Delta = 1$。当 Δ 为较大的正值时，哈密顿量有能隙，且系统处于铁磁有序态。在 $-1 \le \Delta < 1$ 之间，该模型处于临界相，描述紧致化自由玻色子的物理，其紧致化半径为 $R=\sqrt{2-\frac{2}{\pi}\text{acos}(\Delta)}$。在 $\Delta = 1$，该模型无能隙，但低能激发是磁振子，具有二次色散关系，因此不存在共形对称性。

我们考虑的第二个模型是横场伊辛模型（TFIM），其哈密顿量为

$$H_{\text{Ising}}=-\sum_{i}\sigma_{\text{x}}^{i}\sigma_{\text{x}}^{i+1}+g\sum_{i}\sigma_{\text{z}}^{i}\,. \tag{SM19}$$

该模型包含两个有隙相：有序相和无序相，它们由位于 $g = 1$ 的量子临界点分隔。此处的场论描述是一个具有 $c = 1/2$ 的共形场论（CFT），描述了无质量自由费米子 [107] 的物理性质。

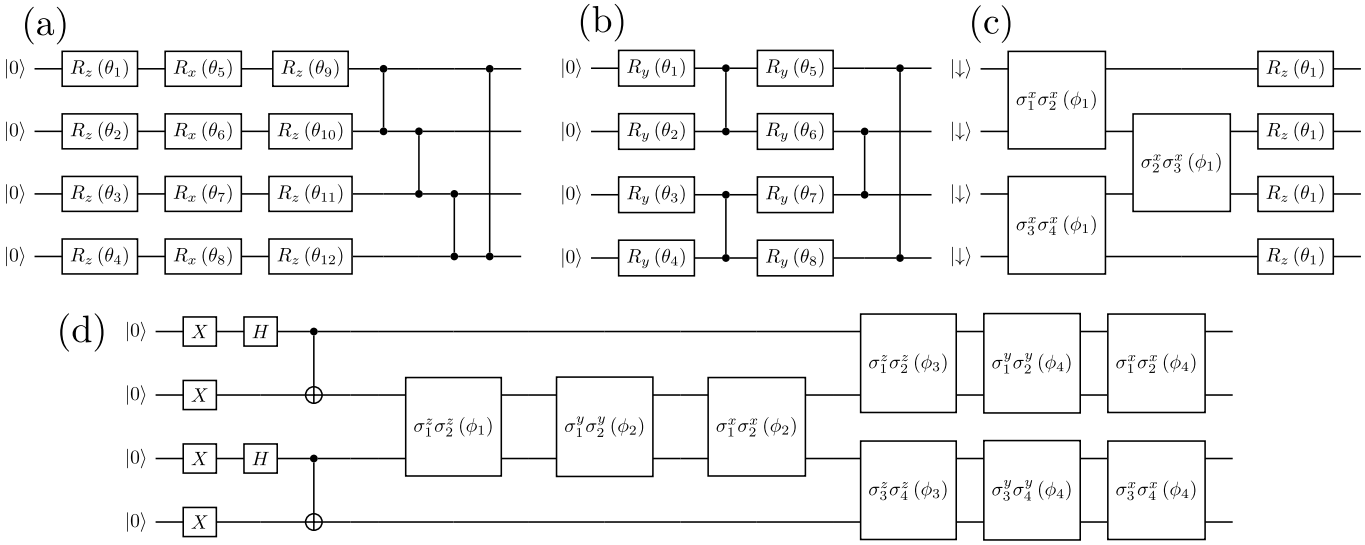


图 SM2。（a）正文中使用的、具有线性纠缠结构的 $N = 4$ 量子比特硬件高效拟设（HEA）单层量子线路图。（b） $N = 4$ 量子比特砖层拟设单层量子线路图，其结构类似于张量网络。（c）如式（SM24）所示，用于计算横场伊辛模型基态的哈密顿量变分拟设（HVA）单层量子线路图，适用于 $N = 4$ 量子比特。（d）如式（SM26）所示，用于计算 XXZ模型基态的哈密顿量变分拟设（HVA）单层量子线路图，适用于 $N = 4$ 量子比特。在这种情况下，我们必须生成一个 $|\Phi^-\rangle$ 贝尔态作为初始态，而这部分量子线路仅在开始时执行一次。

我们考虑的最后一个模型是具有长程相互作用的伊辛模型（LRTFIM），

$$H_{\mathrm{ILR}} = -\sin\theta \sum_{i\neq j} \frac{1}{|i-j|^{\alpha}} \sigma_{\mathrm{x}}^{i}\sigma_{\mathrm{x}}^{j} + \cos\theta \sum_{i=1}^{N} \sigma_{\mathrm{z}}^{i}\,, \tag{SM20}$$

其中， $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$ 决定横场与自旋自发趋于排列的倾向之间的比值。通过改变 θ，该模型呈现出有序相和无序相这两种相；两者均有能隙，但关联呈幂律衰减，熵呈对数标度 [108]。对于 α 的每一种取值，都存在一个临界点，将这两种相分隔开来；在临界点处，系统变为无能隙。临界点的位置以及决定关联函数幂律衰减的指数值，均取决于 α [76–78]。在此，我们重点考察 $\alpha = 1/2$、1、3这三个不同取值，并在每种情况下选择 θ 使其处于临界点 [62]。

C. 本文所考察试探态的回顾

典型的变分试探态（如式（SM16）所示）由单量子比特操作和纠缠层组合而成。尽管可选方案几乎没有限制，但硬件误差以及上文所述的贫瘠高原问题，使可行的量子电路大幅减少。下文将简要介绍实现变分量子本征求解器时通常采用的固定结构试探态，相关内容见文献 [4] 及其中的参考文献。不过值得注意的是，固定结构试探态这一限制也可以加以利用，因为近年来已有研究提出了具有自适应结构的试探态。在这种情况下，会从算符池中动态选取量子门，以最大化代价函数的梯度，从而在量子化学问题中获得准确结果 [99, 103]。然而，在本研究中，我们决定聚焦于固定结构试探态，将自适应结构留待未来研究。

因此，为了检验我们的波导 ans¨atze 求取所考虑的不同自旋模型准确基态的能力，我们将其与以下 ans¨atze 进行比较：

- 硬件高效拟设（HEA）首次在文献 [6]中提出，并被其他理论研究用作典型基准。在其最初的形式中，该试探态利用了底层硬件中量子比特之间有限的连接性，从而形成了如下所示的量子线路：该线路由绕 z、 x和 z轴的单量子比特旋转层（用于生成任意 $U(1)$旋转）以及随后的一系列线性纠缠双量子比特门层组成

见图 SM2(a)。根据公式 SM16，该量子线路对应的酉算符为

$$U_{\mathrm{HEA}}\left(\mathbf{\Theta}\right)=\prod_{i=1}^{D}\prod_{j=1}^{N}\mathrm{CZ}_{i,i+1}R_{i,z}^{j}\left(\theta_{i,z1}^{j}\right)R_{i,x}^{j}\left(\theta_{i,x}^{j}\right)R_{i,z}^{j}\left(\theta_{i,z2}^{j}\right)\,, \tag{SM21}$$

其中 $\mathrm{CZ}_{i,\ j}$ 是作用于第 $i-$ 个控制量子比特和第 $j-$ 个目标量子比特上的受控-Z 门（采用周期性边界条件，即对于包含 N 个量子比特的量子线路，第 $N+1$ 个量子比特与第 1 个量子比特相同）。

这些纠缠层的目标是尽可能地产生纠缠。因此，为了帮助我们决定使用哪种双量子比特门，我们计算了两种不同硬件高效变分算法的纠缠谱：一种使用 CZ 门作为双量子比特门，另一种则使用 CNOT 门代替 CZ 门。结果如图 SM3 所示，其中绘出了该试探态 [35] 在不同层数下的纠缠谱¨。此外，若考虑一组按照 Haar 测度分布的随机量子态（从定性角度而言，这意味着覆盖整个可能态的希尔伯特空间），则已知其纠缠谱遵循随机矩阵本征值的 Marchenko-Pastur 分布；该分布在图 SM3 中以黑色虚线表示。只有使用 CZ 门的试探态最终达到 Marchenko-Pastur 分布，因此证明了正文中采用这种试探态的合理性。

• 砖层拟设 [63]按照受时间演化块解耦（TEBD）算法启发的方案，使纠缠层在偶数和奇数编号的量子比特之间交替排列。由于有限系统中的能隙永远不会闭合，在连续时间演化下，任何初始态都可以绝热地变形为同一相中的另一态；其基于 TEBD 算法的 Trotter 化方案启发了这一试探态的结构。图 SM2(b) 展示了 $N=4$ 个量子比特、单层的示例。在实际模拟中，我们还加入了最后一层单量子比特旋转（参见文献 [63]）。对于这种试探态，相应的酉算符为:

$$U_{\mathrm{BLA}}\left(\mathbf{\Theta}\right)=\prod_{i=1}^{D}R_{i,y}^{0}\left(\theta_{i,y}^{0}\right)\prod_{j=1}^{N}\mathrm{CZ}_{2i,2i+1}R_{i,y}^{j}\left(\theta_{i,y2}^{j}\right)\mathrm{CZ}_{2i-1,2i}R_{i,y}^{j}\left(\theta_{i,y1}^{j}\right)\,, \tag{SM22}$$

同样采用周期性边界条件，$N+1\equiv1$。

• 哈密顿量变分拟设（HVA） [31–35], 受到量子近似优化算法（QAOA）和绝热量子计算的启发。它的提出源于硬件高效算法（HEA）和砖层试探态中出现的贫瘠高原问题¨，该问题意味着，由于采用随机参数初始化，这些试探态无法扩展到数量可观的量子比特。这些观察表明，变分量子算法需要针对问题定制的试探¨态，使其优化景观尽可能凸。为此，HVA 使用目标哈密顿量中的所有项作为量子线路中所施加量子门的生成元。具体而言，若要寻找哈密顿量$H=\sum_{\alpha}H_{\alpha}$的基态，其中$\left[H_{\alpha},H_{\alpha'}\right]\neq0$，对于 $\alpha\neq\alpha'$，那么深度为 D 的 HVA 可写为

$$U_{\mathrm{HVA}}\left(\mathbf{\Theta}\right)=\prod_{i=1}^{D}\prod_{\alpha}e^{-i\theta_{i}^{\alpha}H_{\alpha}}\,, \tag{SM23}$$

其中，将某个哈密顿量项 H_{α_0}的基态作为输入量子线路的初始态 $|\psi_0\rangle$，前提是该项不是最先作用于该态的项。文献 [35] 深入研究了哈密顿量变分算法，指出其受问题启发的特性使其具有足够的表达能力，能够获得精确解，同时其结构化特性也足以支持

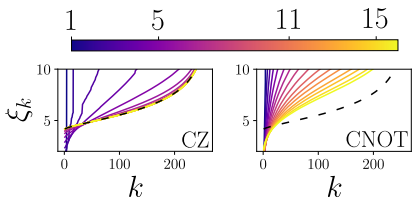


图 SM3。硬件高效算法的纠缠谱 [参见图 SM2(a)]，采用 CZ门和 CNOT门作为纠缠操作，并展示不同层数（用不同颜色表示）的结果。黑色虚线表示 Marchenko-Pastur 分布。这些结果是在考虑 $N=16$ 个量子比特，并对量子电路参数空间进行 $M=500$ 次随机评估后取平均得到的。

高效优化。哈密顿量变分算法的主要优势在于，它能够有效探索相关希尔伯特空间，而非整个希尔伯特空间；它将启发基于张量网络的经典变分方法的一些思想引入量子计算领域。请注意，如果量子线路的深度足够大，式 SM23 就类似于基态在哈密顿量 $H=(1-s)H_{\alpha_0}+s\sum_\alpha H_\alpha$ 作用下的 Trotter 化绝热时间演化：哈密顿量从 $s=0$ 绝热地变化至 $s=1$，但时间步长 $\{\theta_i^\alpha\}$ 经过经典优化，以便更准确地描述实际基态。

具体而言，考虑由式 (SM19) 给出的横场伊辛模型。假设采用开放边界条件且$g>0$，该系统的深度为 D 的哈密顿量变分算法形式为

$$U_{\text{HVA TFIM}}(\boldsymbol{\Theta})=\prod_{j=1}^{D}e^{-i\theta_j H_z}e^{-i\phi_j H_{xx}}\,, \tag{SM24}$$

其中，我们将式 (SM19) 中的各项分别标记为 $H_{xx}=-\sum_{i=1}^{N-1}\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x$ 和 $H_z=\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^z$。该量子线路的一层如图 SM2 所示。

另一方面，一维 XXZ 哈密顿量由式 (SM18) 中的哈密顿量描述。根据参考文献 [35], ，为了实现哈密顿量变分算法，我们需要将链划分为偶数键和奇数键，从而得到 $H_{\text{XX}}=H_{\text{XX}}^{\text{even}}+H_{\text{XX}}^{\text{odd}}$，其中 $H_{\text{XX}}^{\text{even}}=H_{\text{xx}}^{\text{even}}+H_{\text{yy}}^{\text{even}}+H_{\text{zz}}^{\text{even}}$和 $H_{\text{XX}}^{\text{odd}}=H_{\text{xx}}^{\text{odd}}+H_{\text{yy}}^{\text{odd}}+H_{\text{zz}}^{\text{odd}}$，并引入简写

$$H_{\alpha\alpha}^{\text{even}}=\sum_{i=1}^{N/2}\sigma_{2i-1}^{\alpha}\sigma_{2i}^{\alpha}\quad\text{and}\quad H_{\alpha\alpha}^{\text{odd}}=\sum_{i=1}^{N/2}\sigma_{2i}^{\alpha}\sigma_{2i+1}^{\alpha}\,, \tag{SM25}$$

对于 $\alpha=x$、y、z。由于 $H_{\text{XX}}^{\text{even}}$与 $H_{\text{XX}}^{\text{odd}}$对易，并且这些项均可分别通过三个连续作用于偶数键和奇数键上的 $\alpha\alpha$ 类相互作用来实现，因此此类哈密顿量的深度为 D 的哈密顿量变分算法量子线路为

$$U_{\text{HVA XXZ}}(\boldsymbol{\Theta})=\prod_{j=1}^{D}e^{-i\theta_{j,x}^{\text{even}}H_{xx}^{\text{even}}}e^{-i\theta_{j,y}^{\text{even}}H_{yy}^{\text{even}}}e^{-i\theta_{j,z}^{\text{even}}H_{zz}^{\text{even}}}e^{-i\theta_{j,x}^{\text{odd}}H_{xx}^{\text{odd}}}e^{-i\theta_{j,y}^{\text{odd}}H_{yy}^{\text{odd}}}e^{-i\theta_{j,z}^{\text{odd}}H_{zz}^{\text{odd}}}\,. \tag{SM26}$$

D. 优化方案和数值细节

绝热辅助变分量子本征求解器 [66] 是一种通过变分量子本征求解器的迭代版本来获得精确基态的算法。一般而言，它将代价函数中使用的目标哈密顿量参数化为

$$H_{\text{cost}}(s)=(1-s)\,H_0+sH_{\text{target}}\,, \tag{SM27}$$

其中，H_0 是一个基态易于制备的初始哈密顿量。该算法以 $H(s)$ 在 $s=0$ 处作为代价函数中的哈密顿量，并以接近 H_0 本征态的状态作为初始态，开始优化。找到最优参数后，稍微增大 s 的值，并再次进行优化，同时将上一次优化得到的参数用作初始猜测。重复这一过程，直至达到 $s=1$ 的值，且代价函数最小化目标哈密顿量 H_{target} 的能量。

该算法的主要优势在于，每次优化时它都从接近基态的位置开始，因此经典优化器无需探索系统希尔伯特空间中不理想的区域，就能找到精确解。然而，每一步中代价函数景观的平坦性仍然是一个问题，因为要最终达到 H_{target} 的基态，就需要针对 s 的每个取值都找到精确解；而这只有在经典优化器能够探索先前找到的解附近的希尔伯特空间时才能实现。因此，将该算法与一些旨在缓解贫瘠高原问题的策略结合起来颇有意义，例如采用问题启发的试探态。

此外，正如正文所述，波导量子电动力学装置中常见的相互作用 $H_{\text{XX/I}}$，分别是 XXZ模型和横场伊辛模型中相互作用哈密顿量的长程版本。在 $L\ll 1$ 极限下，这些长程哈密顿量可以精确映射为其最近邻版本，即

$$H_{\text{XX}}=J\sum_{i\neq j}e^{-|i-j|/L}\sigma_{eg}^{i}\sigma_{ge}^{j}\simeq J_{\text{XX}}\sum_{i}\sigma_{eg}^{i}\sigma_{ge}^{i+1}\,, \tag{SM28}$$

if

$$J_{\text{XX}}=\frac{J}{2}e^{+1/L}\quad\text{and}\quad L\ll 1\,, \tag{SM29}$$

对于 H_{I}，也可以等价地进行同样的映射。因此，采用波导量子电动力学相互作用时，我们生成的量子电路会以与目标哈密顿量中相同类型的相互作用来纠缠量子比特，但借助这种长程连接将相互作用扩展到最近邻之外。这样有望更充分地探索希尔伯特空间，因为这些相互作用能够纠缠相距较远的量子比特，从而以更少的层到达更多状态。

考虑到这些量子线路，在正文中，我们将以下算符作为式 SM27 中出现的 H_0 和 H_{target}：

- *XXZ*模型：我们取 $H_0=\sum_i \sigma_i^z\sigma_{i+1}^z$ 和 $H_{\text{目标}}=H_{\mathrm{XXZ}}$。
- 横向场伊辛模型：我们取 $H_0=\sum_i \sigma_i^z$和 $H_{\text{目标}}=-\sum_i \sigma_i^x\sigma_{i+1}^x+\sum_i \sigma_i^z$。
- 长程横向场伊辛模型：在这种情况下，我们取 $H_0=\sum_i \sigma_i^z$和 $H_{\text{目标}}=-\sum_{i\neq j} \sigma_i^x\sigma_j^x/\left|i-j\right|^{\alpha}$。注意，在 $\alpha\to\infty$, $s=1/2$ 极限下，代价函数中使用的哈密顿量是处于临界点的最近邻伊辛哈密顿量。此外，在这种情况下，我们对不同取值的 s 数值计算了 $H_{\text{代价}}(s)$的谱，并在 $s_{\text{终止}}$ 时停止迭代优化，使得基态的精确能量（$E_{\text{基态}}$）与第一激发态的精确能量（$E_{1\text{激发态}}$）之差为$|E_{\text{基态}}-E_{1\text{激发态}}|<1/N^2$，其中 N 为量子比特数。这为我们提供了对能隙最小点的数值估计，该点在 $N\to\infty$极限下将恢复相变。

算法步骤如下：

1. 算法从微扰情形开始，此时代价函数中的相互作用项（正比于 s）相比单量子比特项（正比于 $1-s$）较小。具体而言，在我们的模拟中，$s=0.1$ 在第一步。另一方面，波导门的初始参数经过设置，使得初始态为 $|\psi_0\rangle\simeq|\downarrow\rangle^{\otimes n}$，其中包含由纠缠层引起的修正。因此，在这一层级上，量子电路实现了一个微扰解，而层数不同可解释为微扰近似阶数逐渐增加。这种情形得益于纠缠门所提供的灵活性：纠缠门可以连续地“开启”，从而在此情形下产生定制解；相比之下，使用 CZ 门的试探态则无法做到这一点，因为纠缠的生成无法通过任何参数控制。除相互作用长度L 最初取为 $L\sim 1$外，所有量子门的初始参数均取自区间 $0.01\times[0,2\pi)$。通过这种初始化，我们从接近恒等算符的状态开始；已知在此处可以避免贫瘠高原。此外，数值测试表明，只要 $L_{\mathrm{initial}}=O,\ \ L$ 的初始值便无关紧要（1）。

2. 通过经典优化来最小化函数

$$E_s\left(\boldsymbol{\Theta}\right)=\left\langle\psi\left(\boldsymbol{\Theta}\right)\right|H_{\mathrm{cost}}(s)\left|\psi\left(\boldsymbol{\Theta}\right)\right\rangle\ . \tag{SM30}$$

由此得到一组参数 $\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{opt}}$，其能量为 $E_s(\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{opt}})$。

3. 随后，略微增大代价函数中 s 的取值（具体而言，按步长 $\Delta s=1/(5N)$ 递增，其中 N 为量子比特的数量）。将先前找到的参数作为合理的初始猜测，进行新一轮经典优化。这一步使代价函数绝热地趋近临界点。

4. 重复步骤 3 和 4，直到达到 $H_{\mathrm{cost}}(s)$ 相图中的目标点，因此优化过程为我们提供了基态的近似值。

关于数值细节，我们结合 Pennylane [109] 和自定义代码来模拟量子电路。具体而言，我们发现，Pennylane 中实现的 Lightning 量子模拟器在性能方面表现最佳。然而，在本研究的开发过程中，由于 Pennylane 不支持实现全局纠缠操作（例如 H_{XX} 哈密顿量的指数），我们使用 Pennylane 执行该矩阵指数的 Trotter 化版本，获得一个合理的初始猜测，然后将其作为初始参数输入自定义编码的量子模拟器；该模拟器使用 PyTorch [110] 优化电路（实现所需的矩阵指数，但带来相当大的数值开销）。

为优化电路，我们采用了 Adam 优化器 [111]，学习率为 $\eta=0.005$（经超参数调优后，我们发现该学习率能取得最佳结果），并在连续两次迭代的成本函数之差小于 10^{-10} 或完成 1000 次迭代时结束优化过程。

E. 评价指标

我们使用两项性能指标来评估结果的质量：第一，优化后的量子电路 $|\psi(\boldsymbol{\Theta}_{\rm opt})\rangle$ 的输出态与通过数值计算得到的实际基态 $|\psi_{\rm GS}\rangle$ 之间的保真度损失：

$$\mathcal{I} = 1 - \mathcal{F} = 1 - |\langle \Psi\left(\boldsymbol{\Theta}_{\rm opt}\right)|\Psi_{\rm GS}\rangle| \,. \tag{SM31}$$

注意，不保真度 $\mathcal{I}$ 为使用变分态计算的任意可观测量 $\mathcal{O}$ 的期望值与实际基态之间差值的上界，因为令 $\mathcal{I} < \beta$，则

$$|\langle\mathcal{O}\rangle_{\rm GS} - \langle\mathcal{O}\rangle_{\rm var}| \leq 2c\sqrt{\beta\left(1-\beta\right)} + \beta \,, \tag{SM32}$$

其中，c 是 $\mathcal{O}$ [35]的算子范数。因此，正文中我们使用不保真度作为衡量指标来评估 ans¨atze。此外，我们还计算了残余能量 ϵ [34]，其定义为

$$\epsilon = \frac{C_{\Psi,H}\left(\boldsymbol{\Theta}_{\rm opt}\right) - E_{\rm GS}}{E_{\rm max} - E_{\rm GS}} \,, \tag{SM33}$$

其中，代价函数 $C_{\Psi,\ H}$ [参见式 SM15] ，在使哈密顿量 H的期望值最小的最优参数 $(\boldsymbol{\Theta}_{\rm opt})$ 处求值，因此它给出了变分态的能量，而 $E_{\rm GS}$ $(E_{\rm max})$ 是 H的最低（最高）本征值。

在图 SM4(a-b) [图 SM4(c-d)] 中，我们分别比较了图 1(a-b) [图 1(c-d)] 所示正文中的 XX [横场伊辛模型] 模型的残余能量 ϵ 和不保真度 $\mathcal{I} = 1 - \mathcal{F}$。值得注意的是，在比较残余能量和不保真度时，wQED-I ans¨atze 与启发式变分算法的结果在定性和定量上都相似，而其他类型的 ans¨atze 得到的态虽然能准确给出残余能量，却无法准确给出不保真度。由于用于优化变分量子线路参数的代价函数是线路输出态上 H 的期望值，这意味着在这些情况下，变分量子算法能够找到能量与基态相近的态，但该态可能与实际基态相距甚远（这种距离以两个态之间的不保真度来量化）。另一方面，由于 wQED-I ans¨atze 和启发式变分算法都使用由目标哈密顿量中各项生成的量子门，因此所生成的变分态空间被限制在哈密顿量基态所在的对称性扇区内，故在该子空间上最小化能量可得到接近实际基态的态。

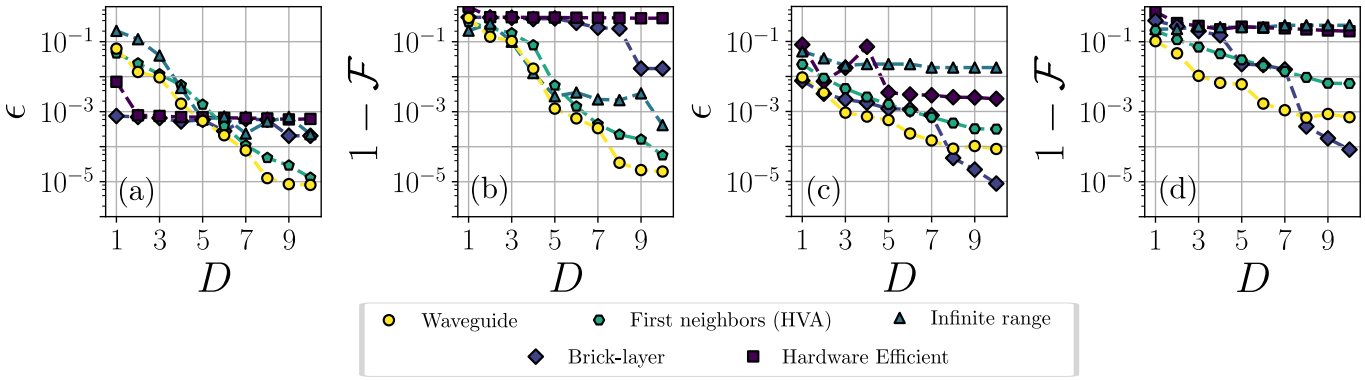


图 SM4。（a-b）残余能量 ϵ 和保真度损失 $1-\mathcal{F}$ [（分别由方程 SM31 和 SM33 给出）]，通过比较 XXZ模型的精确基态与采用不同 ans¨atz 的优化变分态得到，并表示为量子线路层数 D 的函数；系统含有 $N = 10$ 个量子比特。（c-d）与（a-b）相同，但考虑大小为 $N = 16$ 个量子比特的横场伊辛模型。

另一方面，在图 SM5 中，我们绘出了残余能量 ϵ 和不保真度 $\mathcal{I}$，它们是通过比较横场伊辛模型的精确基态与优化变分态得到的，并表示为量子线路层数的函数；图中还展示了不同系统规模 N下的结果。可以看出，随着量子比特数量增加，其定性行为仍然保持不变（采用 wQED-I ans¨atz 的方法和启发式变分算法随着层数增加，保真度略有提高）。因此，正文中只展示了利用我们的计算资源能够处理的最大系统规模对应的结果，但我们预计在 N取更大值时不会出现定性差异。

此外，变分算法旨在减少噪声对量子电路的影响。随着深度（即量子门的数量）的增加，这种噪声对最终量子态造成的影响会被放大，

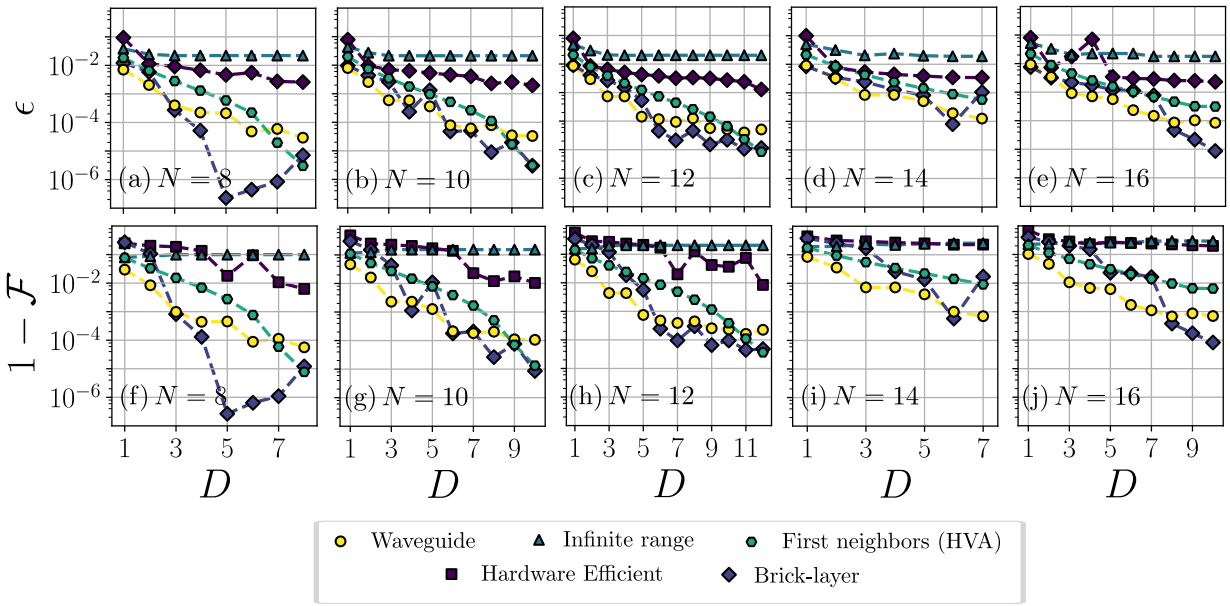


图 SM5。（a-e）通过比较横场伊辛模型的精确基态能量与使用不同 ans¨atz 和电路深度 D 得到的优化变分能量，获得的残余能量 ϵ；对应的量子比特数分别为 $N=8$、10、12、14 和 16。（f-j）与（a-e）相同，但展示的是不保真度 $1-\mathcal{F}$，而非残余能量。

因此，适用于 NISQ 设备的良好方案应在获得基态良好近似的同时，尽可能降低深度。从这个意义上说，我们还使用达到某一阈值 δ 以上的变分量子态与实际基态之间保真度损失所需的最小深度，来量化正文中研究的不同量子电路的质量。也就是说，若电路 $U_{\min}(\boldsymbol{\Theta}_{\rm opt})=\prod_{i=1}^{D_{\min}}\prod_{j=1}^{N}R_i^j(\theta_i^j)W_i(\boldsymbol{\phi}_i)$ 生成的量子态 $|\Psi_{\min}(\boldsymbol{\Theta}_{\rm opt})\rangle$ 满足如下条件，则我们达到这一最小深度 $D_{\min}$：

$$\mathcal{I}=1-|\langle\Psi_{\min}(\boldsymbol{\Theta}_{\rm opt})\,|\Psi_{\rm GS}\rangle|<\delta\,. \tag{SM34}$$

SM3. 误差建模

此处概述用于在图 4 所示模拟中引入退相干效应的一般噪声模型。正如正文所述，采用参考文献 [6] 中的平台无关模型，旨在以一种通用方式初步估计噪声对这些 ans¨atz 的影响，而不深入讨论不同波导量子电动力学平台中可能出现的各种噪声来源；这些噪声可能具有截然不同的物理起源 [37–53]。该模型将噪声过程近似为：在施加量子门后，对系统密度矩阵依次施加振幅阻尼和退相位信道。这意味着，对处于状态 $|\psi\rangle$ 的系统施加任意酉算符 U，在无噪声情况下，

$$|\psi\rangle\to U\,|\psi\rangle\ , \tag{SM35}$$

现在，对于等效密度矩阵 $\rho=|\psi\rangle\langle\psi|$，该过程将变为：

$$\rho\to\tilde{\rho}=U\rho U^{\dagger}\to\tilde{\rho}_a=E_0^a\tilde{\rho}E_0^{a\,\dagger}+E_1^a\tilde{\rho}E_1^{a\,\dagger}\to\tilde{\rho}_{a,d}=E_0^d\tilde{\rho}_aE_0^{d\,\dagger}+E_1^d\tilde{\rho}_aE_1^{d\,\dagger}\,, \tag{SM36}$$

其中，矩阵 E_i^a/E_i^d 生成振幅阻尼/退相干信道，其形式为

$$E_0^a=\begin{pmatrix}1&0\\0&\sqrt{1-p_a}\end{pmatrix},\quad E_1^a=\begin{pmatrix}0&\sqrt{p_a}\\0&0\end{pmatrix},\quad E_0^d=\begin{pmatrix}1&0\\0&\sqrt{1-p_d}\end{pmatrix}\quad\text{and}\quad E_1^d=\begin{pmatrix}1&0\\0&\sqrt{p_d}\end{pmatrix}. \tag{SM37}$$

在式 SM37 中，p_a 和 p_d 对应于计算过程中发生此类错误的概率，该概率取决于所使用的具体器件。此外，为简便起见，我们假设 $p_a=p_d\equiv p$（这在超导器件 [112]中通常成立），但对于多量子比特门，我们取比其高一个数量级的错误概率

，因为这些操作目前噪声最大，因此也是错误的主要来源。此外，对于 wQED 多量子比特门，我们假设其错误概率不取决于作用范围。最后，为了得到图 4，我们首先执行无噪声的绝热辅助变分量子本征求解器，以获得变分态 $|\Psi(\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{opt}})\rangle$ ，该态在理想情况下近似于基态；然后将得到的参数 $\boldsymbol{\Theta}_{\mathrm{opt}}$ 作为合理的初始猜测，仅在关注点处运行变分量子本征求解器，同时纳入振幅阻尼通道和相位阻尼通道。

我们知道，该模型无法再现实际实验设置的全部复杂性，并且针对每个具体平台，还应考虑更多细节。例如，整个优化过程都应考虑噪声，因为众所周知，含噪声的量子电路具有更平坦的优化景观 [113] ，因而难以优化得多；还应纳入有限测量次数所导致的散粒噪声，以及不完美的量子门控制。不过，这个简单的噪声模型属于最理想的情况；即便如此，包含更多双量子比特门的电路（例如砖墙结构电路）仍不如波导量子电动力学 ans¨atzes。根据这项分析，我们预计，更复杂的误差模型也会得出相同结论：波导量子电动力学 ans¨atzes 较浅的深度，即使在现实场景中，也可能有利于变分量子算法。更深入的分析将留待未来工作。