自适应变分量子算法在晶格场论中的前景与局限： 2+1 维案例研究

Nico Dichter ,[1], Andrea Bulgarelli ,[1] Lena Funcke ,[1] 以及 Stefan Kühn [2]
[1] *Transdisciplinary Research Area "Building Blocks of Matter and Fundamental Interactions" (TRA Matter) and Helmholtz Institute for Radiation and Nuclear Physics (HISKP),University of Bonn, Nussallee 14-16, 53115 Bonn, Germany*[2] *Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, Platanenallee 6, 15738 Zeuthen, Germany*（日期：2026年11月25日）

此前，变分量子本征求解器 ADAPT-VQE 已被用于制备 $1+1D$中的规范理论真空态。本文研究其能否推广至更高维度。我们指出 ADAPT-VQE 存在两项普遍局限。首先，如果量子比特哈密顿量和初始态均为实数，即在量子比特层面的时间反演下保持不变，那么所有取实值的算符池算符梯度都会消失，因此永远不会被选中。其次，该算法可能收敛到激发本征态。我们阐明了这两项局限，并提供文献中的相关实例；此外，还首次将 ADAPT-VQE 应用于 $2+1D$中的晶格场论，即自由威尔逊费米子，此时这两项障碍均会出现。将电荷共轭对称性纳入算符池可改善结果；结合不同的算符池与合适的初始态，则能够在整个质量范围内恢复基态和第一激发态。这些发现为将 ADAPT-VQE 应用于 $1+1D$以外的晶格场论提供了实用指南。

arXiv:2611.33138v1 [hep-lat] 24 Nov 2026

I. 引言

近年来，晶格场论的哈密顿量表述 [1]日益受到关注，因为它能够研究传统蒙特卡罗方法难以触及的区域。基于张量网络或量子计算机的模拟不依赖重要性采样，因此可以避免符号问题；例如，有限密度、含有拓扑项或处于非平衡状态的理论都会受到这一问题的影响。在量子计算机上，相关应用大致分为两类：用于研究非平衡动力学的实时演化，以及对基态和低能激发态性质的研究（近期综述参见文献 [2–6] ）。这两类应用都需要一种高效方法，在量子设备上制备基态或其他感兴趣的状态。

在当前的含噪硬件上 [7], ，变分量子本征求解器（VQE） [8–10] 是完成这一任务的有力工具。量子设备执行参数化量子电路，并在经典计算机上优化其参数，以使能量最小化。其适用性受到量子线路深度 [11–16], 、贫瘠高原 [17–19]和局部极小值 [20], 的限制，同时还受限于缺乏系统构造试探态的方法。ADAPT-VQE [21] 通过从算符池出发迭代式扩展量子线路来解决最后一个问题：在每一步中，加入能量梯度最大的算符。其可扩展变体SC-ADAPT-VQE已在超过100个量子比特上，利用交错费米子制备出了Schwinger模型的真空态 [22, 23]。

这引出了一个问题：这些算法能否推广到 $2+1D$ 和 $3+1D$ 晶格场论中。这不仅仅是规模的问题，因为超出 $1+1D$后，交错费子不再能在哈密顿量表述中完全消除费子倍增 [24]。威尔逊费米子 [25–27] 是常见的替代方案，但它们会改变量子比特哈密顿量的对称性，并在谱中引入能级交叉 [28]。因此，在更高维度中有把握地应用 ADAPT-VQE 之前，我们需要了解这种算法何时以及为何有效，以及它本身有哪些局限。

在本文中，我们确定了 ADAPT-VQE 的两个一般性约束。第一个约束源于量子比特层面的时间反演对称性。在量子比特上，时间反演在计算基中表现为复共轭，因此，当量子比特哈密顿量的矩阵元均为实数时，它具有时间反演对称性。对于这样的哈密顿量和实初始态，每个取实值的算符池算符的梯度都为零，因而永远不会被选中。需要特别指出的是，这种量子比特级对称性未必与物理系统的时间反演对称性相一致。第二个约束是，每个能量本征态的梯度都为零，因此 ADAPT-VQE 一旦到达激发态，就可能过早收敛。我们进一步分析了将理论的对称性纳入算符池和初始态这一已确立的技术 [22, 23, 29, 30], 如何影响 ADAPT-VQE 的收敛。

在通过文献中的实例，即 $1+1D$ [22]中的Schwinger模型和 [31], 中的超对称量子力学，阐述这些限制后，我们首次将ADAPT-VQE应用于 $2+1D$中的晶格场论：二维空间中的自由Wilson费米子

$\times 2$ 晶格。这一完全可解的系统 [32] 是一个受控测试平台。尽管物理上的时间反演对称性被破缺，其量子比特哈密顿量仍为实数；此外，ADAPT-VQE 会在激发态处过早收敛，因此这两种障碍均会出现。采用遵守电荷共轭的算符池可以改善结果，但没有任何单一设置能够在所有质量下都达到基态。尽管如此，通过结合不同的

* nico@dichter.eu

算符池与适当选择的初始态，我们在整个质量范围内重构出了基态和第一激发态。因此，我们的分析为将 ADAPT-VQE 应用于超越$1+1D$的晶格场论提供了指导。

本文其余部分安排如下：第二节回顾变分量子本征求解器（VQE）和 ADAPT-VQE。第三节推导算法约束，并重新审视文献中的示例。第四节介绍 $2+1D$ 案例研究，最后在第五节作出总结。

II. 算法

本节简要回顾变分量子本征求解器（VQE）和 ADAPT-VQE，并介绍全文使用的符号。

A. 变分量子本征求解器

VQE 最初由 Peruzzo 等人提出 [8]，，是一种量子-经典混合算法，通过最小化给定代价可观测量的期望值来优化参数化态；该期望值 O 可在量子计算机上高效测量。在本文中，我们始终将 O 选为所研究系统的哈密顿量，也可以在其中加入惩罚项。

VQE 依赖于两个要素：一个易于在量子计算机上制备的初始态 $|\psi_0\rangle$，以及一个参数化量子电路 $U(\vec{\theta})$，其结构可依据对系统的先验知识来确定。算法步骤如下：

1. 初始化参数向量 $\vec{\theta}^{(0)}$。
2. Prepare the state $\left|\psi\left(\vec{\theta}^{(n)}\right)\right\rangle = U\left(\vec{\theta}^{(n)}\right)\left|\psi_0\right\rangle$ on a quantum computer.
3. 在量子计算机上测量代价观测量的期望值 O：

$$f_c\left(\vec{\theta}^{(n)}\right) = \langle O\rangle_{\vec{\theta}^{(n)}} = \left\langle\psi\left(\vec{\theta}^{(n)}\right)\right| O \left|\psi\left(\vec{\theta}^{(n)}\right)\right\rangle.$$

4. 将代价函数 $f_c\left(\vec{\theta}^{(n)}\right)$ 传递给经典优化器，由其提出更新后的参数 $\vec{\theta}^{(n+1)}$。如果优化器已收敛，则终止并返回 $\left|\psi\left(\vec{\theta}^{(n)}\right)\right\rangle$ 作为最终态；否则，设置 $n \to n+1$ 并返回步骤 2。

步骤 2 和 3 在量子设备上执行，其 N量子比特寄存器自然张成一个 2^N维希尔伯特空间，而在一般情况下，对其进行经典表示的代价呈指数增长。步骤 4 中的经典优化可以使用 COBYLA [33] 和 COBYQA [34], 等无梯度优化器，也可以使用 SLSQP [35]等基于梯度的优化器。无论选择哪一种，变分量子本征求解器都可能遭遇贫瘠高原，即参数空间中存在大片区域，其中代价函数的梯度会随系统规模增大而呈指数级消失 [17, 18], ；已有研究表明，这等价于代价函数的值呈指数级集中在狭窄的峡谷中 [19]。此外，即使不存在贫瘠高原，代价景观中优质局部极小值的稀缺也会使优化变得困难 [20]。

另一项挑战在于量子线路本身的设计，因为目前没有一种可系统改进的程序来构造变分拟设。因此，我们需要寻找一种不要求预先固定量子线路的变分算法先验地。

B. ADAPT-VQE

ADAPT-VQE 最初由 Grimsley等人 [21],提出，它通过自适应例程扩展了变分量子本征求解器：该例程以给定代价函数的梯度为指导，迭代构建量子线路，从而取代固定的参数化量子电路$U(\vec{\theta})$。

与变分量子本征求解器一样，ADAPT-VQE 依赖两个主要要素。第一个同样是初态 $|\psi_0\rangle$，它易于在量子计算机上制备。参数化电路则被厄米算符池 $P = \{A_i | i \in \{1,\ldots,N_{\text{Pool}}\}\}$ 取代，其组成可根据对系统的先验知识来确定。给定代价可观测量 O 后，算法按以下步骤进行：

1. Initialize the state to $\left|\psi^{(n=0)}\left(\vec{\theta}^{(n=0)}\right)\right\rangle = |\psi_0\rangle$. The parameter vector $\vec{\theta}^{(n=0)}$ is empty.
2. 测量代价可观测量景观沿每个算符 A_i 方向的新 θ_{n+1} 梯度：

$$\begin{aligned}\frac{\partial E^{(n)}}{\partial\theta_i} &:= \frac{\partial}{\partial\theta_i}\left(\left\langle\psi^{(n)}\right| \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_i A_i} O \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_i A_i}\left|\psi^{(n)}\right\rangle\right|_{\theta_i=0} \\ &= \left\langle\psi^{(n)}\right| [O, \mathrm{i}A_i]\left|\psi^{(n)}\right\rangle. \end{aligned} \tag{1}$$

3. 如果梯度向量的模

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{N_{\text{Pool}}}\left(\frac{\partial E^{(n)}}{\partial\theta_i}\right)^2}, \tag{2}$$

小于预定义阈值 ε，则退出，最终态为 $\left|\psi^{(n)}\left(\vec{\theta}^{(n)}\right)\right\rangle$。否则，选择关联梯度模最大的算符，并将其命名为 $A^{(n+1)}$。

4. 如果选定的算符 $A^{(n+1)}$ 与上一次迭代中选定的算符相同，则以 $\left|\psi^{(n)}\left(\vec{\theta}^{(n)}\right)\right\rangle$给出的最终态退出。

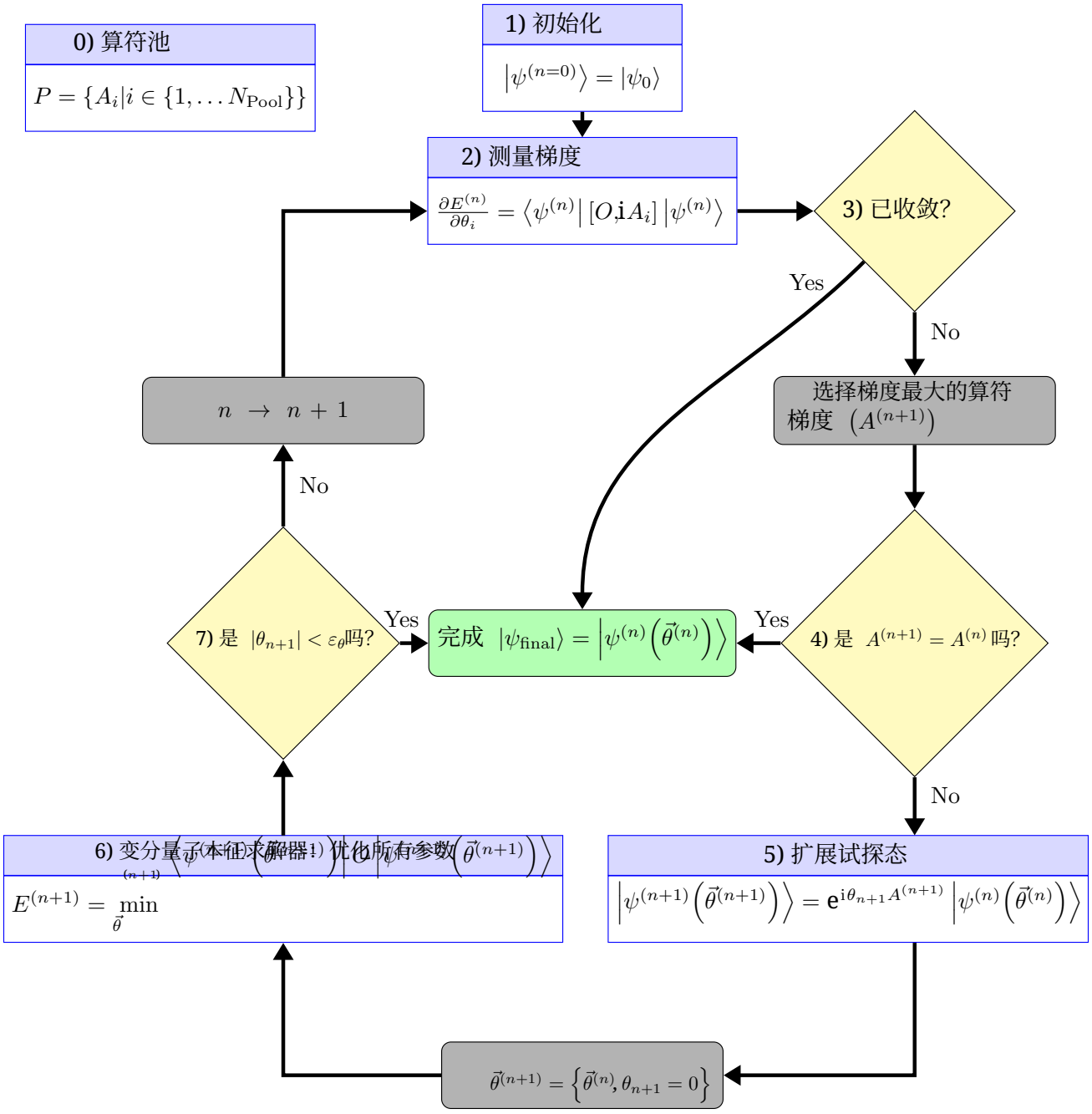


图 1. 描述 ADAPT-VQE算法主要步骤的流程图。有关详细描述和符号说明，请参见第 II B 节。请注意，原始 ADAPT-VQE算法 [21] 仅包含步骤 3 的退出选项，步骤 7 的退出选项见文献 [22], ，而步骤 4 的退出选项则是本工作引入的修改。

5. 通过添加幺正算符 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{n+1}A^{(n+1)}}$ 来扩展拟设态：

$$\left|\psi^{(n+1)}\left(\vec{\theta}^{(n+1)}\right)\right\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{n+1}A^{(n+1)}} \left|\psi^{(n)}\left(\vec{\theta}^{(n)}\right)\right\rangle. \quad (3)$$

这会为试探态添加一个新的 参数 θ_{n+1} 其初始化为 $\theta_{n+1} = 0$。

6. 使用 $\vec{\theta}^{(n+1)} = \left\{\vec{\theta}^{(n)}, \theta_{n+1} = 0\right\}$ 的初始参数向量，运行 VQE 优化子程序。该程序从 VQE 算法的步骤 2 开始，并优化所有参数。

7. 如果 $|\theta_{n+1}|$ 小于预定义阈值 ε_θ,

则退出，并将最终态设为 $\left|\psi^{(n)}\left(\vec{\theta}^{(n)}\right)\right\rangle$。在此情况下，略去符号上的严格区分，$\vec{\theta}^{(n)}$ 表示优化参数向量 $\vec{\theta}^{(n+1)}$的前 n 个分量。

8. 返回步骤 2，并令 $n \to n+1$。

这些步骤的示意图见图1。步骤 5 中新添加的参数初始化为零，因为步骤 2 中的梯度是在该值处计算的。原始 ADAPT-VQE 算法 [21]仅包含步骤 3 的退出选项；步骤 7 的退出选项是在参考文献 [22], 中引入的，而步骤 4 的退出选项则是本研究提出的一项修改。提出这项修改的原因是，对于 $A^{(n+1)} = A^{(n)}$，新添加的参数是冗余的，因为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_{n+1}A^{(n)}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_n A^{(n)}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\theta_n+\theta_{n+1})A^{(n)}}. \tag{4}$$

请注意，梯度阈值 ε、参数阈值 ε_θ以及 VQE 子程序中优化器的目标精度 $\varepsilon_{\mathrm{opt}}$ 应保持一致地调整。具体而言，如果 $\varepsilon_{\mathrm{opt}}$ 相对于 ε设得过大，就可能在连续两次迭代中选中同一个算符。同样，如果 $\varepsilon_{\mathrm{opt}}$ 相对于ε_θ设得过大，步骤 7 的退出条件可能无法触发，从而再次导致连续选中同一个算符。

III. ADAPT-VQE 的算法约束

A. 时间反演对称性

本节将说明，在量子比特层面（即将原始理论映射到量子比特之后），时间反演对称性会强烈限制 ADAPT-VQE 可选择的算符。在量子比特上，时间反演在计算基中表现为复共轭；因此，若量子比特哈密顿量在该基下的矩阵元均为实数，则它具有时间反演对称性。对于这样的哈密顿量和实值波函数，我们发现：

- 式 (1) 中的梯度与算子池算符 A各分量的实部无关，
- 如果 A 的所有分量均为实数，则梯度恒为零，因此这些算符永远不会被选中；若算符池仅包含此类算符，ADAPT-VQE 将在第一次迭代时退出，
- 如果所选算符是纯虚的，那么波函数在每次迭代后仍保持为实数，因此 ADAPT-VQE 受到实值波函数的约束。这并不限制对能量本征态的搜索，因为实哈密顿量的本征向量总可以选为实值。

请注意，量子比特哈密顿量的时间反演对称性不必与原物理系统的时间反演对称性一致。特别是在场论中，时间反演对称性通常会对场的旋量分量产生非平凡作用，见第 IV A2 节。时间反演对称性在 ADAPT-VQE 中所起的作用已在文献 [36] 中作过简要提及；本文将在此对其进行明确推导，并讨论其在晶格场论背景下的影响。

在下文中，我们将二进制索引串

$$(i_0, \ldots, i_{N-1}) \text{ where } \forall j \in \{0, \ldots, N-1\} : \; i_j \in \{0, 1\}$$

将一般 N 量子比特态映射为单个索引 $i \in \{0, \ldots, 2^N - 1\}$。据此，我们可以写成

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{2^N-1} c_i \, |i\rangle \, . \tag{5}$$

作用于 N 个量子比特的哈密顿量则变为

$$H = \sum_{i,j=0}^{2^N-1} h_{ij} \, |i\rangle \, \langle j| \, , \tag{6}$$

类似地，任意作用于 N个量子比特的厄米算符 A

$$A = \sum_{i,j=0}^{2^N-1} a_{ij} \, |i\rangle \, \langle j| \, . \tag{7}$$

这里 c_i, h_{ij}, $a_{ij} \in \mathbb{C}$和 $|i\rangle = |i_0, \ldots, i_{N-1}\rangle$表示 N量子比特的计算基态。

为证明上述总结的陈述，我们将式 (1) 中的梯度分解为其中各个量的实部和虚部

$$\begin{aligned} & a_{ij} = a_{ij}^R + \mathrm{i}a_{ij}^I \\ \text{where} \quad & a_{ij}^R = a_{ji}^R \quad , \quad a_{ij}^I = -a_{ji}^I \\ \text{and} \quad & a_{ij}^R, a_{ij}^I \in \mathbb{R}. \end{aligned} \tag{8}$$

哈密顿量的情形类似：

$$h_{ij} = h_{ij}^R + \mathrm{i}h_{ij}^I. \tag{9}$$

由此，我们可以将 ADAPT-VQE 中使用的梯度写为

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \theta} &\overset{1}{=} \langle\psi| \, [H, \mathrm{i}A] \, |\psi\rangle \\ &\overset{\substack{5\\6\\7}}{=} \mathrm{i}c_i^*(h_{ij}a_{jk} - a_{ij}h_{jk})c_k \\ &\overset{\substack{8\\9}}{=} c_i^* \Big[\mathrm{i}\big(h_{ij}^R a_{jk}^R - a_{ij}^R h_{jk}^R\big) - \mathrm{i}\big(h_{ij}^I a_{jk}^I - a_{ij}^I h_{jk}^I\big) \\ &\qquad - \big(h_{ij}^R a_{jk}^I - a_{ij}^I h_{jk}^R\big) - \big(h_{ij}^I a_{jk}^R - a_{ij}^R h_{jk}^I\big) \Big] c_k \\ &= c_i^* \left[\mathrm{i}\alpha_{ik} - \mathrm{i}\beta_{ik} - \varphi_{ik} - \xi_{ik} \right] c_k \end{aligned} \tag{10}$$

从现在起，多重指标上的求和均为隐式求和。最后一步中，我们引入了以下分量：

$$\begin{aligned}
\alpha_{ik} &= h^R_{ij}a^R_{jk} - a^R_{ij}h^R_{jk} = -\left(a^R_{ij}h^R_{jk} - h^R_{ij}a^R_{jk}\right) \\
&\overset{8}{\overset{9}{=}} -\left(a^R_{ji}h^R_{kj} - h^R_{ji}a^R_{kj}\right) = -\alpha_{ki}, \qquad (11)\\
\beta_{ik} &= h^I_{ij}a^I_{jk} - a^I_{ij}h^I_{jk} = -\left(a^I_{ij}h^I_{jk} - h^I_{ij}a^I_{jk}\right) \\
&\overset{8}{\overset{9}{=}} -\left(a^I_{ji}h^I_{kj} - h^I_{ji}a^I_{kj}\right) = -\beta_{ki}, \qquad (12)\\
\varphi_{ik} &= h^R_{ij}a^I_{jk} - a^I_{ij}h^R_{jk} = -\left(a^I_{ij}h^R_{jk} - h^R_{ij}a^I_{jk}\right) \\
&\overset{8}{\overset{9}{=}} \left(a^I_{ji}h^R_{kj} - h^R_{ji}a^I_{kj}\right) = \varphi_{ki}, \qquad (13)\\
\xi_{ik} &= h^I_{ij}a^R_{jk} - a^R_{ij}h^I_{jk} = -\left(a^R_{ij}h^I_{jk} - h^I_{ij}a^R_{jk}\right) \\
&\overset{8}{\overset{9}{=}} \left(a^R_{ji}h^I_{kj} - h^I_{ji}a^R_{kj}\right) = \xi_{ki}. \qquad (14)
\end{aligned}$$

我们现在假设，计算基中的波函数除一个无关紧要的全局相位外均为实数，即 $c_i \in \mathbb{R}$，然后可以引入对称分量

$$c_{ik} = c_i c_k = c_i^* c_k = c_{ki}. \qquad (15)$$

利用这些结果，式（10）可简化为：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial \theta} &\overset{10}{=} c_i^* \left[\mathrm{i}\alpha_{ik} - \mathrm{i}\beta_{ik} - \varphi_{ik} - \xi_{ik}\right] c_k \\
&= c_{ik}\left[\mathrm{i}\alpha_{ik} - \mathrm{i}\beta_{ik} - \varphi_{ik} - \xi_{ik}\right] \\
&\overset{11}{\overset{12}{=}} \\
&\overset{15}{=} -c_{ik}\left[\varphi_{ik} + \xi_{ik}\right] \\
&\overset{13}{\overset{14}{=}} -c_{ik}\left[h^R_{ij}a^I_{jk} - a^I_{ij}h^R_{jk} + h^I_{ij}a^R_{jk} - a^R_{ij}h^I_{jk}\right].
\end{aligned} \qquad (16)$$

对于时间反演对称量子比特哈密顿量 $h^I_{ij} = 0$，上述表达式可化简为

$$\frac{\partial E}{\partial \theta} = -c_{ik}\left[h^R_{ij}a^I_{jk} - a^I_{ij}h^R_{jk}\right], \qquad (17)$$

它仅取决于 A 的虚部，因此证明了前两条结论。第三条结论则是因为纯虚算符 $a^R_{ij} = 0$ 会生成一个实正交门 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta A}$，根据式（3），每次扩展试探态后波函数仍保持为实数，因此可以迭代应用这一论证。

B. 激发态处的过早收敛

由于能量本征态是能量泛函的驻点，ADAPT-VQE 可能会过早终止于激发态。尽管这一行为已在量子化学应用中通过数值方法被观察到 [37], ，我们在此讨论这一障碍，并表明它对于（晶格场）理论尤为相关在存在能级交叉的情况下，基态的特性会随理论参数而改变，正如我们在第IV节中对威尔逊费米子所观察到的那样。

要理解 ADAPT-VQE 为何会在此类情况下终止，请注意，对于每个能量本征态 $|\psi\rangle$，$H|\psi\rangle = E_\psi|\psi\rangle$，梯度都为零。将其代入式（1）可得

$$\frac{\partial E}{\partial \theta_i} = \langle\psi|\left[H, \mathrm{i}A_i\right]|\psi\rangle = \mathrm{i}E_\psi\langle\psi|\left(A_i - A_i\right)|\psi\rangle = 0 \qquad (18)$$

对于所有算符池中的算符 A_i。因此，一旦以足够高的保真度制备出能量本征态，式 (1) 中的所有梯度便近似为零，ADAPT-VQE 会过早收敛。这一局限看似无法避免，但如第 V 节所述，采用非局域选择准则可以缓解，甚至在某种程度上规避这一问题。

C. 对称性的作用

通过将算符池限制为保持对称性的算符，并选择处于确定对称性扇区中的初始态，将对称性纳入 ADAPT-VQE，是一种成熟的技术 [22, 23, 29, 30]。为求完整起见，我们在此简要回顾这一方案，并分析它如何影响 ADAPT-VQE 的收敛，具体而言，是通过避免能量上的平坦方向，并减少可达希尔伯特空间的维数及算符池的规模。

对称性可由希尔伯特空间上的一个（反）酉算符 S 表示，该算符与哈密顿量对易。可通过施加以下条件，将这种对称性纳入算符池：

$$\forall A_i \in P:\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta A_i} \overset{!}{=} S\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta A_i}S^{-1} = \mathrm{e}^{\theta S\mathrm{i}A_i S^{-1}}. \qquad (19)$$

这等价于施加

$$[A_i, S] = 0 \qquad (20)$$

若 S 是幺正的，且

$$\{A_i, S\} = 0 \qquad (21)$$

若 S 是反幺正的。

然后选择初始态 $|\psi_0\rangle$ 为 S 的本征态

$$S|\psi_0\rangle = \alpha_{S,0}|\psi_0\rangle, \qquad (22)$$

我们可以保证，使用 ADAPT-VQE 获得的 S 本征态作为最终态时，其本征值与初始态 $|\psi_0\rangle$相同 [38]：

$$\begin{aligned}
S\left|\psi^{(n)}\left(\vec{\theta^{(n)}}\right)\right\rangle &\overset{3}{=} S\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_n A^{(n)}}\ldots\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_1 A^{(1)}}|\psi_0\rangle \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_n A^{(n)}}\ldots\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_1 A^{(1)}}S|\psi_0\rangle \\
&\overset{22}{=} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_n A^{(n)}}\ldots\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_1 A^{(1)}}\alpha_{S,0}|\psi_0\rangle \\
&\overset{3}{=} \alpha_{S,0}\left|\psi^{(n)}\left(\vec{\theta^{(n)}}\right)\right\rangle.
\end{aligned} \qquad (23)$$

现在我们讨论该方案如何影响 ADAPT-VQE 的收敛行为：

• 避免平坦方向。考虑两个简并能量本征态，它们满足 $S|\psi_{s_1}\rangle = s_1|\psi_{s_1}\rangle$和 $S|\psi_{s_2}\rangle = s_2|\psi_{s_2}\rangle$，且 $s_1 \neq s_2$。如果未将对称性 S 纳入算符池，ADAPT-VQE 可能收敛到 $|\psi_{s_1}\rangle$和 $|\psi_{s_2}\rangle$的任意叠加态。如果纳入 S，ADAPT-VQE 则会根据初始态 $|\psi_0\rangle$的选择，复现 $|\psi_{s_1}\rangle$或 $|\psi_{s_2}\rangle$，从而避免沿着连接这两个态的能量平坦方向进行搜索。

•缩小搜索空间。相关希尔伯特空间的维数降低。同时，算符池也会缩小，因为它可以限制为与 S相容的算符。

•精度得到提升。通过将电荷共轭对称性纳入试探态，我们从经验上发现，能量本征态的重构效果有所改善，正如我们在第四节中所展示的那样。

D. 文献中的示例

1. *Explaining the performance of ADAPT-VQE in the Schwinger model*

第三节A中所考虑的实值哈密顿量和波函数的情形，可能看起来过于特殊。然而，Farrell等人[22]将 SC-ADAPT-VQE 应用于 Schwinger模型的最成功案例之一，恰好属于这一类别。

该工作通过在量子比特层面将时间反演（T）对称性施加到算符池上，避免了第三节A中所描述的问题。具体而言，

$$\begin{aligned}\forall A_i \in P:\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta A_i} &\overset{!}{=} \mathsf{T}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta A_i}\mathsf{T}^{-1} \\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta \mathsf{T} A_i \mathsf{T}^{-1}}.\end{aligned}$$

由于时间反演对称性作用于量子比特时实际上就是复共轭，这等价于条件

$$A_i = -A_i^*.$$

施加这一条件会将算符池限制为纯虚算符，从而避免第三节A中所指出的问题。然而，正如该节所示，纳入时间反演对称性并不仅仅是提高效率的一种可选方案（第三节C中讨论的对称性便属于此类），而是 ADAPT-VQE 能够运行的必要条件。

此外，还对算符池施加了物理系统的电荷共轭和宇称（CP）对称性。如第三节C所述，这在多个方面改善了 ADAPT-VQE 的收敛特性。

2. *Supersymmetric Quantum Mechanics*

在 Kerfoot等人[31]近期的研究中，可以找到一个关于第三节A所讨论局限性的额外例子。他们考虑了实值哈密顿量和波函数，并提出了一个由$\{R_{\mathbf{Y}}, R_{\mathbf{Z}}, cR_{\mathbf{Y}}\}$组成的算符池。由于 $R_{\mathbf{Z}}$ 是一个实算符，第三节A表明，对于任意实态，其梯度恒等于零。因此，它永远不会被选中，只会增加每次 ADAPT-VQE 迭代的测量成本。这表明，第三节A中概述的障碍也会出现在晶格场论之外。

请注意，严格来说，[31] 中使用的算法并不等同于 ADAPT-VQE，因为算符池中也包含受控旋转，而后者无法写成厄米算符的指数形式。尽管如此，我们的结果也适用于这种情况。

IV. $2+12+1$维中的案例研究

现在我们转向第一个 $2+1D$ 案例研究，即自由有质量威尔逊费米子 [25]。据我们所知，这是 ADAPT-VQE 在 $2+1D$ 晶格场论中的首次应用。由于自由费米子的哈密顿量是二次型，其基态是一个 Slater行列式，可以用深度已知的量子线路精确制备 [32]。因此，我们并不打算与这类成熟的非变分方法竞争，而是将自由理论用作测试平台：其谱（包括 $m+2r \in \{-2,0,2\}$ 处的能级交叉）是已知的，其量子比特哈密顿量也呈现了第三节A和第三节 B 中讨论的两种障碍。

A. 理论设置

本文考虑的格点哈密顿量写作

$$\begin{aligned}&H_{\mathrm{Free}} \\ &= \sum_{n\in\Lambda}\Bigg[-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{2}\left\{\overline{\Psi}(n)\left(\mathrm{i}\gamma^j + r\right)\Psi\left(n+\widehat{j}\right) + \mathrm{h.c.}\right\} \\ &\qquad + \overline{\Psi}(n)\,(m+2r)\,\Psi(n)\Bigg],\end{aligned} \tag{24}$$

其中，$m \in \mathbb{R}$ 是质量参数，$r \in \mathbb{R}$ 是Wilson参数，

$$\Lambda = \left\{(n_x, n_y)\middle| n_i \in \{0,\ldots,N_i-1\}\right\} \tag{25}$$

表示所引入的周期性晶格，$\{N_x, N_y\}$ 是以格点间距 a为单位的 Λ 空间范围。$\widehat{j}$ 表示 j^{th} 空间方向上的单位向量。

在 $2+1D$ $\Psi(n)$ 中是一个二分量旋量。我们选择将上分量映射到 $m_x = 2n_x$，将下

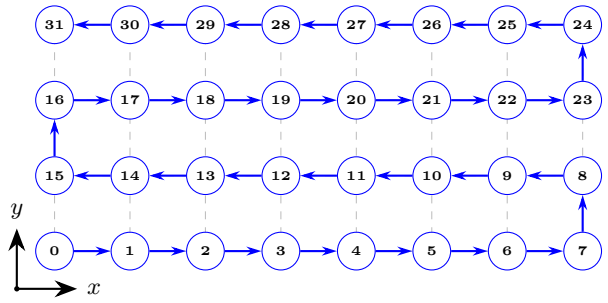


图 2 $M_x = 8 \times 4 = N_y$ 。二维（）晶格上费米子模的蛇形排序。

分量映射到 $m_x = 2n_x + 1$:

$$\Psi(n) = \Psi(n_x, n_y) =: \begin{pmatrix} \Phi(2n_x, n_y) \\ \Phi(2n_x + 1, n_y) \end{pmatrix}, \tag{26}$$

使得 $\Phi(m_x,\ n_y)$ 是定义在 $m_x \in \{0, \ldots, M_x - 1\}$、$n_y \in \{0, \ldots, N_y - 1\}$ 上的费米子模，其中我们定义了$M_x = 2N_x$。

公式（24）随后可以用$\Phi(m_x,\ n_y)$ 表示（详情参见附录 A）。

1. *Mapping fermions to qubits*

为了在量子计算机上模拟该理论，我们使用 Jordan-Wigner 变换（JWT） [39]，将公式（26）中引入的费米子模 $\Phi(m_x,\ n_y)$ 映射到量子比特上。我们在此简要回顾这一映射，因为其中涉及两个之后会变得重要的选择：二维晶格上费米子模的排序，以及每个费米子模的相位约定。后者决定所得量子比特哈密顿量的分量是实数还是复数，因而也决定第三节A中的障碍是否会出现。

对于 JWT，我们需要为费米子模 $\Phi(m_x, n_y)$确定一个线性排序。由于这些模已定义在边长分别为 $M_x = 2N_x$ 和 N_y的二维晶格上，我们可以选择如图 2 所示的蛇形排序。随后，可根据晶格坐标 (m_x, n_y)按如下方式得到排序索引 j：

$$j(m_x, n_y) := \begin{cases} M_x n_y + m_x & n_y \text{ even}, \\ M_x(n_y + 1) - (m_x + 1) & n_y \text{ odd}. \end{cases} \tag{27}$$

该变换的详细过程见附录 B。由此得到的算符为映射如下

$$\Phi(m_x, n_y) =: \Phi(j(m_x, n_y)) = \Phi_j \tag{28}$$

$$\Phi_j = \left(\prod_{n=0}^{j-1} \mathbf{Z}^{(n)} \right) \left(\sigma^+\right)^{(j)}, \tag{29}$$

$$\Phi_j^\dagger = \left(\prod_{n=0}^{j-1} \mathbf{Z}^{(n)} \right) \left(\sigma^-\right)^{(j)}, \tag{30}$$

其中，$\sigma^\pm = \frac{1}{2}(\mathbf{X} \pm \mathbf{iY})$、$\mathbf{X}$、$\mathbf{Y}$ 和 $\mathbf{Z}$ 表示泡利矩阵，而一个一般态

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{i_0,\ldots,i_{N-1}=0}^{1} C_{i_0,\ldots,i_{N-1}} \underbrace{\left(\Phi_0^\dagger\right)^{i_0} \cdots \left(\Phi_{N-1}^\dagger\right)^{i_{N-1}} |\omega\rangle}_{=:|i_0,\ldots,i_{N-1}\rangle} \\ &= \sum_{i_0,\ldots,i_{N-1}=0}^{1} C_{i_0,\ldots,i_{N-1}} |i_0, \ldots, i_{N-1}\rangle , \end{aligned} \tag{31}$$

被映射为相应的量子比特态，其中引入了 $N := M_x N_y$，并定义参考态 $|\omega\rangle = |0, \ldots, 0\rangle$ 使其满足：

$$\forall j \in \{0, \ldots, N-1\}: \quad \Phi_j |\omega\rangle = 0. \tag{32}$$

将费米子模 Φ_j 忠实地映射到量子比特后，我们现在可以用作用于量子比特态的算符来表示 H_{Free}。将式（29）和（30）代入式（A2），可得由泡利字符串线性组合构成的哈密顿量。我们不具体展示这一代换过程；该过程由附录C中所述的实现完成。

2. *Discrete symmetries and obstacles in 2 + 1D*

本节讨论 $2 + 1D$ 中自由Wilson费米子的离散对称性，以及它们对ADAPT-VQE的影响。我们将在第IV节C 3中利用电荷共轭构造保持对称性的算符池。此外，我们还将说明，尽管物理系统的时间反演对称性被破坏，但通过JWT作用于 2×2晶格得到的量子比特哈密顿量，在第三节A所述的意义上具有时间反演对称性，即其取值为实数，这也造成了该节讨论的障碍。

有质量费米子的离散对称性在二维空间中颇为特殊。具体而言，$m \neq 0$宇称P和时间反演T均被显式破坏。唯一未破缺的离散对称性是电荷共轭C，它作用于二分量旋量 Ψ上如下：

$$\mathsf{C}\Psi\mathsf{C}^{-1} = \sigma_x \left(\Psi^\dagger\right)^\intercal . \tag{33}$$

通过遵循与 Weinberg [40, 第（2.6、4.2、5.5）节] 类似的推理思路，可以看出，对于此处所选的

式（A1）中的伽马矩阵，由此可得式（26）中引入的费米子模 $\Phi_j = \Phi(m_x, n_y)$ 的变换行为为：

$$\mathsf{C}\Phi(m_x,n_y)\mathsf{C}^{-1} = \begin{cases} \Phi^\dagger(m_x+1,n_y) & m_x \text{ even}, \\ \Phi^\dagger(m_x-1,n_y) & m_x \text{ odd}. \end{cases}$$

按照公式（27）中引入的排序，这可表示为

$$\mathsf{C}\Phi_j\mathsf{C}^{-1} = \begin{cases} \Phi^\dagger_{j+1} & j \text{ even}, \\ \Phi^\dagger_{j-1} & j \text{ odd}. \end{cases} \tag{34}$$

在电荷共轭下，一般基态$|i_0,\ldots,i_{N-1}\rangle$ 按量子比特对 $(k, k+1)$ 逐块变换，其中 k 为偶数。在每个块内，

$$\begin{aligned} |00\rangle &\xrightarrow{\mathsf{C}} |11\rangle, \qquad |01\rangle \xrightarrow{\mathsf{C}} |01\rangle, \\ |10\rangle &\xrightarrow{\mathsf{C}} -|10\rangle, \quad |11\rangle \xrightarrow{\mathsf{C}} |00\rangle. \end{aligned} \tag{35}$$

通过在晶格模型的构型空间和动量空间中识别电荷最小和最大的态，即可根据公式（34）得到这种变换行为。

如前所述，此处物理系统的时间反演对称性已被破坏。尽管如此，经过 JWT 后得到的量子比特哈密顿量仍可能具有时间反演对称性。这是因为量子比特层面的时间反演对称性不涉及旋量分量。因此，该变换定义为计算基中的复共轭；这意味着量子比特哈密顿量在计算基中的分量均为实数。

更准确地说，附录 B 中采用的 JWT 约定会将费米子模 $\Phi_j^{(\dagger)}$ 映射为分量为实数的多量子比特算符。因此，公式（24）中 H_{Free} 唯一可能的虚部贡献来自伽马矩阵项。对于具有周期性边界条件的2×2 晶格，该项会完全抵消，因为相邻晶格点实际上被连接了两次。

总之，对于自由Wilson费米子的 2×2 晶格，物理系统中的时间反演对称性被破坏，但当其映射后的哈密顿量被视为量子比特哈密顿量时，该对称性得以保留。

B. 数值设置与变分量子本征求解器基线

在下文中，我们将设置变分模拟的数值设置，并讨论变分量子本征求解器作为基线，用于获取自由Wilson费米子理论的基态和低激发态性质。

我们考虑总电荷为零的扇区

$$Q\,|\Psi\rangle = 0, \tag{36}$$

其中电荷算符 Q 由下式给出

$$Q = \sum_{m_x=0}^{M_x-1}\sum_{n_y=0}^{N_y-1}\left(\Phi^\dagger(m_x,n_y)\Phi(m_x,n_y) - \frac{1}{2}\right), \tag{37}$$

以及作用于量子比特上的算符

$$Q = \sum_{j=0}^{N-1}\frac{1}{2}\left(-\mathbf{Z}^{(j)}\right). \tag{38}$$

我们通过向哈密顿量中添加如下形式的惩罚项来施加这一限制

$$H_{Q,\text{penalty}} = \lambda_Q Q^2, \tag{39}$$

加入哈密顿量 H_{Free}后，这些算法的代价函数现在给出为

$$f_c\left(\vec{\theta}\right) = \langle O\rangle_{\vec{\theta}} = \langle\psi(\theta)|\left(H_{\text{Free}} + \lambda_Q Q^2\right)|\psi(\theta)\rangle. \tag{40}$$

以下选择系数 λ_Q 为 $\lambda_Q = 100$，并将 Wilson参数固定为 $r = 1$ [41]。

本文考虑一个大小为 $N_x = N_y$ =2、具有周期性边界条件的晶格。由此，式 (26) 中引入的费米子模定义在大小为 $(M_x = 4) \times (N_y = 2)$ 的晶格上。

因此，该系统定义在 $N_{\text{qubits}} = 8$ 个量子比特上。得到的 $2^8 \times 2^8$ 哈密顿量矩阵足够小，可以进行精确对角化；由此获得的能量本征值可作为验证变分量子本征求解器和 ADAPT-VQE 的参考。所有这些混合量子-经典算法的结果，均通过 Qiskit [42] 提供的 StatevectorEstimator 模拟理想的无噪声量子计算机获得。

1. *VQE baseline results*

我们首先应用第 II A 节介绍的变分量子本征求解器来制备基态，以此作为比较 ADAPT-VQE 的基准。这需要一个初始态 $|\psi_0\rangle$ 和一个参数化量子电路 $U(\boldsymbol{\theta})$。我们选择以下状态作为初始态：

$$|\psi_{0,0}\rangle = |01010101\rangle, \tag{41}$$

我们使用 Schuster 等人 [43] 此前用于 $1+1D$情形的各层来构建参数化量子电路。具体而言，试探态由厄米算符 $\{\mathbf{XX}+\mathbf{YY}、\mathbf{Z}\}$生成的门组成。每一层包含两组连续的双量子比特门，其形式为 $\exp\left(-i\theta(\mathbf{XX}+\mathbf{YY})/2\right)$：首先作用于从偶数索引开始、彼此不重叠的量子比特对，随后作用于从奇数索引开始、彼此不重叠的量子比特对。接着，对每个量子比特施加单量子比特 $\mathbf{Z}$ 旋转。每个门都有各自的参数。初始态选取在电荷为零的扇区中，且这些算符与电荷算符对易。初始参数 $\theta_i^{(0)}$ 在 $(0,\ 2\pi)$ $\forall i$ 中均匀采样。

现在，我们可以针对质量参数 m 的不同取值进行 VQE 优化。由此得到的最终能量值如图 3 所示，对应的试探态层数分别为

$N_{\text{layers}} = 2$、4 和 8。此外，我们还展示了相对于最终态的哈密顿量最终标准差

$$\sigma_H = \sqrt{\text{Var}(H_{\text{Free}})} = \sqrt{\langle H_{\text{Free}}^2 \rangle - \langle H_{\text{Free}} \rangle^2},$$

在底部面板中，并作为顶部面板中的误差条。需要强调的是，后者不应被解读为统计误差：该量的值越小，对能量本征态的近似保真度越高。

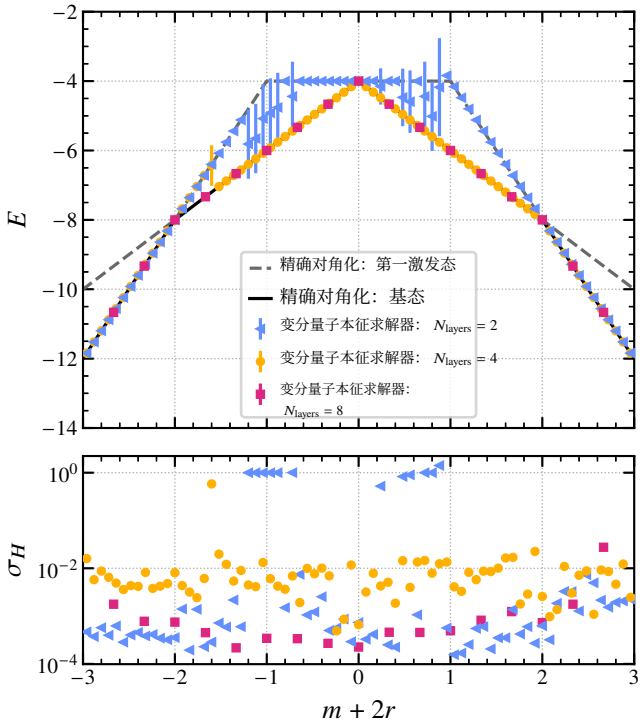


图3。能量（上）以及对数刻度下哈密顿量的标准差（下）随平移质量 $m + 2r = m + 2$ 的变化。我们展示了通过精确对角化获得的基态（黑色实线）和第一激发态（灰色虚线），以及通过变分量子本征求解器获得的最终态；后者采用由 $N_{\text{layers}} = 2$、4 和 8 层组成的参数化量子电路，分别对应蓝色三角形、橙色圆点和洋红色方块。所使用的无梯度优化器为 COBYLA，迭代上限为 $I_{\max} = 20\,000$，目标精度为 $\varepsilon_{\text{opt}} = 1 \times 10^{-4}$。

我们观察到，由 $N_{\text{layers}} = 8$ 层组成的参数化量子电路 $U(\vec{\theta})$ 能够在所有参数区域重构基态。对于 $N_{\text{layers}} = 4$ 层的情况，除 $-2 < m + 2r < -1$ 外，我们在所有参数区域都观察到了基态的重构。

由于变分量子本征求解器（VQE）步骤 1 中的初始化是随机进行的，我们的结果可能会受到这一初始化的影响。通过使用不同的随机种子进行多次优化运行，我们验证了这一点。我们观察到，对于 $-2 < m+2r < -1$ 和 $1 < m+2r < 2$，基态重构取决于参数初始化。通过进行多次（$\mathcal{O}(5)$）优化运行，并针对每个质量参数仅采用最终能量的最小值，我们因此能够使用 $N_{\text{layers}} = 4$ 层参数化量子电路$U(\vec{\theta})$重构基态。

仅使用 $N_{\text{layers}} = 2$ 层时，只有在 $m + 2r < -2$ 和$m + 2r > 2$ 的情况下才能成功重构基态。这是首次出现以下情况：$m + 2r = -2$，0，$+2$ 处的能级交叉导致第一激发态主要在中间区域 $-2 < m + 2r < 2$ 中被重构；这一模式在后文中反复出现。这些能级交叉发生时平移质量的整数值与 Golterman等人 [28] 的理论预测一致。

此外，从底部面板可以看到，在该区域，多次优化运行并未得到能量本征态。对于这些情况，标准差为 $\mathcal{O}(1)$，并且所得到的能量值与顶部面板中精确对角化给出的任何特定能级都不匹配。

C. ADAPT-VQE 结果

本节讨论将 ADAPT-VQE 应用于 $2 + 1D$ 威尔逊费米子的分析。在指出 ADAPT-VQE 在重现与变分量子本征求解器相同的量子线路方面存在的根本局限性之后，我们分析不同的算符池以及对称性在本设置中的作用。

1. *Failure for real valued operators*

作为首次测试，我们检验 ADAPT-VQE 是否能够重新构造用于变分量子本征求解器的参数化电路。为此，我们采用一种所谓的“贪心”方法，仅提供基本组成部分，即单量子比特算符和双量子比特算符。初始态再次为$|\psi_{0,\,0}\rangle = |01010101\rangle$，算符池 $P^{(0)}$ 由集合给出

$$\begin{aligned}
P_{1,i}^{(0)} &:= \left\{ -\frac{1}{2}\mathbf{Z}^{(i)} \right\}, \\
P_{2,i}^{(0)} &:= \left\{ -\frac{1}{2}\left(\mathbf{X}^{(i-1)}\mathbf{X}^{(i)} + \mathbf{Y}^{(i-1)}\mathbf{Y}^{(i)} \right) \right\}, \\
P^{(0)} &:= \left(\bigcup_{i=0}^{N_{\text{qubits}}-1} P_{1,i}^{(0)} \right) \cup \left(\bigcup_{i=1}^{N_{\text{qubits}}-1} P_{2,i}^{(0)} \right),
\end{aligned} \tag{42}$$

使得这些算符经过指数化后得到旋转门 $R_{\mathbf{XX+YY}}$ 和 $R_{\mathbf{Z}}$。

给定初始态$|\psi_{0,\,0}\rangle$ 和算符池 $P^{(0)}$，现在可以清楚地看出，优化程序会在第 3 步立即退出，而不会向试探态中添加任何门。这是因为量子比特哈密顿量具有时间反演对称性，初始波函数为实值，且算符池中的所有算符均为实数：第一次迭代时，所有梯度 (1) 都为零。

接下来我们发现，ADAPT-VQE 无法重构任意量子线路。具体而言，已知可通过变分量子本征求解器模拟到达基态的量子线路，通常都超出了 ADAPT-VQE 的能力范围。

有多种方法可以避免这个问题。一种方法是选择一个取值为复数的初始波函数 [44]。另一种方法是在算符池中加入复数算符。在接下来的章节中，我们将详细探讨后一种方法。此外，由于哈密顿量的显式分量映射到量子比特后，取决于 JWT 中采用的约定相位选择，因此还可以选择 JWT 中不同的局域相位约定。

2. *Minimal pool*

到目前为止，试探态的设计使其从总电荷为零的扇区开始，并始终保持在该扇区内。现在我们放宽这一约束，因为不存在与电荷算符对易且含有非实分量的厄米单量子比特算符。

具体而言，我们选择等权叠加态作为初始态

$$|\psi_{0,1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^8}} \sum_{k=0}^{2^8-1} |k\rangle\,, \tag{43}$$

通过对所有量子比特施加哈达玛门，即可在量子计算机上轻松制备该态。现在我们将使用的算符池为

$$\begin{aligned} P_{1,i}^{(1)} &:= \left\{ -\frac{1}{2}\mathbf{Y}^{(i)} \right\}, \\ P_{2,i}^{(1)} &:= \left\{ -\frac{1}{2}\left(\mathbf{X}^{(i-1)}\mathbf{Y}^{(i)} - \mathbf{Y}^{(i-1)}\mathbf{X}^{(i)}\right) \right\}, \\ P^{(1)} &:= \left(\bigcup_{i=0}^{N_{\text{qubits}}-1} P_{1,i}^{(1)} \right) \cup \left(\bigcup_{i=1}^{N_{\text{qubits}}-1} P_{2,i}^{(1)} \right). \end{aligned} \tag{44}$$

选择该算符池是为了包含非实值算符。由 $P_{2\,i}^{(1)}$ 得到的门 $R_{\mathbf{XY-YX}}$，是通过采用 Farrell 等人 [22]提出的量子线路实现的。可以证明，这些双量子比特算符与电荷算符对易，而单量子比特算符则不与 Q对易。

现在，我们可以采用这一算符池选择 $P^{(1)}$ 和初始态$|\psi_{0,1}\rangle$，针对不同的质量参数 m 值进行 ADAPT-VQE 优化。以此方法得到的最终能量值及哈密顿量的标准差如图4所示。此外，我们还在下方的面板中展示了惩罚项 $\lambda_Q \langle Q^2 \rangle \overset{40}{=} f_c - E$。

首先，我们注意到，使用算符池 $P^{(1)}$ 和初始态$|\psi_{0,\,1}\rangle$，ADAPT-VQE 能够在 $m + 2r < -2$ 和 $m + 2r > 2$ 的情况下复现基态。接下来

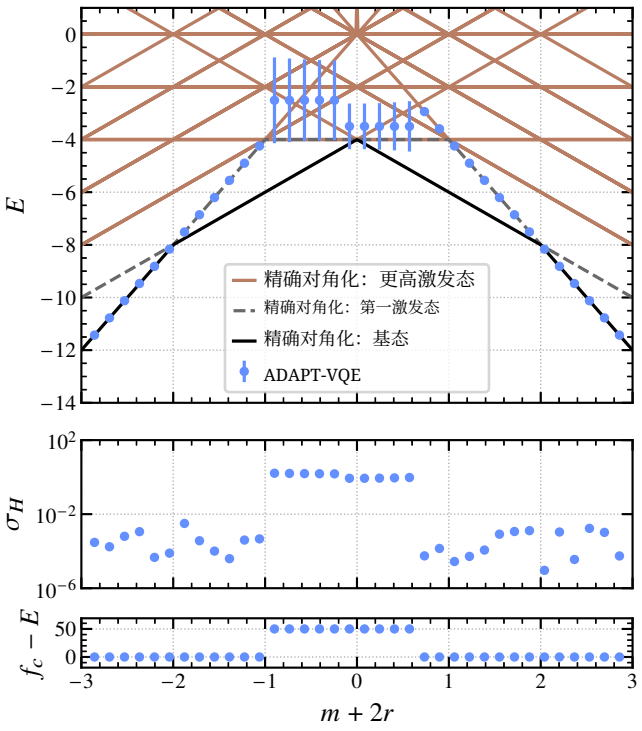


图4. 能量（顶部）、哈密顿量的标准差（中部）以及惩罚项（底部）随平移质量 $m + 2r = m + 2$ 的变化。我们展示了通过 ED 获得的基态、第一激发态和能量最低的更高激发态，以及在 2×2 格点上通过 ADAPT-VQE 获得的最终态。ADAPT-VQE 的阈值参数设为 $\varepsilon = 1 \times 10^{-3}$ 和 $\varepsilon_\theta = 1 \times 10^{-3}$。VQE 子程序使用 SLSQP 作为优化器，在每次 ADAPT-VQE 迭代中的迭代上限为$I_{\max} = 20\,000$，目标精度为 $\varepsilon_{\text{opt}} = 1 \times 10^{-6}$。

在中间区域，我们遇到了第二个实例：第四节 B 1 小节中讨论的能级交叉导致重构的是第一激发态，而不是基态。这说明了第三节 B 中所述的 ADAPT-VQE 的第二个局限性。在重构基态或第一激发态的情况下，与第四节 B 1 小节中的 VQE 基线相比，保真度略有提高：中间面板中哈密顿量的最终标准差为 $\mathcal{O}(10^{-3})$。

在剩余区域 $-1 < m + 2r < 1$ 中，十次优化运行均未能重构基态。中部面板显示，这些运行未收敛到能量本征态，因为标准差为 $\mathcal{O}(1)$，且所得能量与顶部面板中 ED 的任何参考能级都不匹配。最后，底部面板显示这些运行的最终惩罚项均不为零，表明最终态位于零电荷扇区之外。这并不令人意外，因为该试探态未被约束在这一对称扇区内。

为完整起见，我们简要概述了在保留最小算符池的同时改善基态收敛性的不同策略。遗憾的是，这些策略均未带来

显著更好的收敛性；相比之下，将电荷共轭对称性纳入试探态则能实现这一点，下一节将对此进行详细讨论。

在第 2 步的梯度测量中加入高斯噪声，旨在逃离激发态处的梯度消失，但对于较窄的噪声分布，至多只能带来边际改善。初始态 $|\psi_0\rangle$ 的波函数即使乘以一个全局相位后也不为实数；为规避第三节A中的问题而选择此类初始态，会始终使结果变差。在 COBYLA、COBYQA 和 SLSQP 这几种优化器中，二次优化器提高了达到基态的运行次数，其中 SLSQP 收敛最快；将目标精度 $\varepsilon_{\mathrm{opt}}$ 放宽 1×10^{-6}，使其超过默认值，会倾向于得到更高激发态，而收紧该精度则没有带来任何益处。将阈值 ε 和 ε_θ 降低到 1×10^{-3} 以下，没有产生明显影响。在不包含惩罚项的情况下，根据 H_{Free}计算第 2 步中的梯度，使算符选择不再受惩罚项支配，但导致更多运行最终落入更高激发态或零电荷扇区之外。最后，我们将算符池限制为保电荷算符。从零电荷扇区出发，仅使用保电荷双量子比特算符，会产生与特定能级相匹配、但并非能量本征态的态；而仅限制双量子比特算符、同时保留不保电荷的单量子比特算符时，表现最佳。上文所示结果均采用该算符池和 SLSQP 优化器获得。

3. Incorporating additional symmetries into the operator pool

在前几节中，我们采用了一种贪心方法，只考虑作用于一个和两个量子比特的算符。此外，迄今为止，对算符池构造的唯一系统性约束，是第三节A中讨论的 ADAPT-VQE 局限性。下面，我们利用第三节C中提出的方案，将第四节A2中讨论的电荷共轭对称性 C 纳入算符池。

如第四节A2中所讨论的，由于电荷共轭在此处是一个未破缺的对称性，基态是 C本征态。因此，原则上，所构造的算符池能够重现基态，前提是初始态具有与目标相同的 C本征值。

一种构造满足公式（20）的厄米算符的方法，是使用公式（24）中给出的哈密顿量H_{Free} 的不变部分，这与此前的做法类似见 Farrell 等人 [22]。具体而言，通过引入

$$
\begin{aligned}
O_1(n) &\coloneqq \overline{\Psi}(n)\Psi(n) = O_1^\dagger(n),\\
O_2(n,j) &\coloneqq \overline{\Psi}(n)\mathrm{i}\gamma^j\Psi\Big(n+\widehat{j}\Big),\\
O_3(n,j) &\coloneqq \overline{\Psi}(n)(-\mathrm{i})\gamma^j\Psi\Big(n-\widehat{j}\Big) = O_2^\dagger\Big(n-\widehat{j},j\Big),\\
O_4(n,j) &\coloneqq \overline{\Psi}(n)\Psi\Big(n+\widehat{j}\Big),\\
O_5(n,j) &\coloneqq \overline{\Psi}(n)\Psi\Big(n-\widehat{j}\Big) = O_4^\dagger\Big(n-\widehat{j},j\Big),
\end{aligned}
$$

我们看到

$$
\begin{aligned}
O_1(n), \qquad & O_2(n,j)+O_2^\dagger(n,j)\\
\text{and} \quad & O_4(n,j)+O_4^\dagger(n,j)
\end{aligned}
$$

与电荷共轭对易。将这些算符表示为费米子模并执行 JWT 后，我们看到，前一类算符中的大多数在作用于量子比特时取实值。因此，这将导致第三节A中讨论的局限性。为规避这一问题，我们可以构造以下算符

$$
\begin{aligned}
A_1(n) &= O_2(n,1)+O_2^\dagger(n,1),\\
A_2(n) &= \mathrm{i}\left[O_1(n), O_2(n,2)+O_2^\dagger(n,2)\right],\\
A_3(n) &= \mathrm{i}\left[O_1(n), O_4(n,1)+O_4^\dagger(n,1)\right],\\
A_4(n) &= \mathrm{i}\left[O_1(n), O_4(n,2)+O_4^\dagger(n,2)\right],
\end{aligned}
$$

这些算符必然取虚数值，并且与电荷共轭对易 [45]。

所构造的算符与 Q对易。电荷共轭算符和荷不变算符池$P^{(2)}$ 现在表示为

$$
P^{(2)} = \{A_i(n) | i\in\{1,2,3,4\}, n\in\Lambda\}. \tag{45}
$$

相应的多量子比特门

$$
U_j^{[n_x,n_y]}(\theta) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}A_j(n_x,n_y)} \tag{46}
$$

可以通过采用与 Algaba等人 [15]所介绍的相同分解和压缩方法，分解为双量子比特门。

现在唯一剩下的任务是选择初始态 $|\psi_0\rangle$，使其总电荷为零，并且成为电荷共轭的本征态，其本征值与基态 [46]的相同。由第 IV A2 节中给出的变换可知，以下状态是有效的选择：

$$
|\psi_{0,0}\rangle = |01010101\rangle \qquad \mathsf{C}|\psi_{0,0}\rangle \overset{35}{=} +1|\psi_{0,0}\rangle, \tag{47}
$$

$$
|\psi_{0,2}\rangle = |01010110\rangle \qquad \mathsf{C}|\psi_{0,2}\rangle \overset{35}{=} -1|\psi_{0,2}\rangle, \tag{48}
$$

$$
|\psi_{0,3}\rangle = |10010101\rangle \qquad \mathsf{C}|\psi_{0,3}\rangle \overset{35}{=} -1|\psi_{0,3}\rangle. \tag{49}
$$

这些态都处于 $Q=0$ 扇区。

4. Numerical results using symmetry-adapted operator pools

接下来，我们将比较前几节中使用算符池 $P^{(1)}$ 得到的结果（此处称为 ADAPT-VQE 1，其中未将电荷共轭作为对称性施加），与使用算符池 $P^{(2)}$ 以及初始态 $|\psi_{0,\ 0}\rangle$、$|\psi_{0,\ 2}\rangle$ 和 $|\psi_{0,\ 3}\rangle$ 得到的新运行结果，即 ADAPT-VQE 2、3 和 4。

具体而言，最终能量值和相应的电荷共轭期望值 $\langle \mathsf{C}\rangle$ 显示于图 5 中。

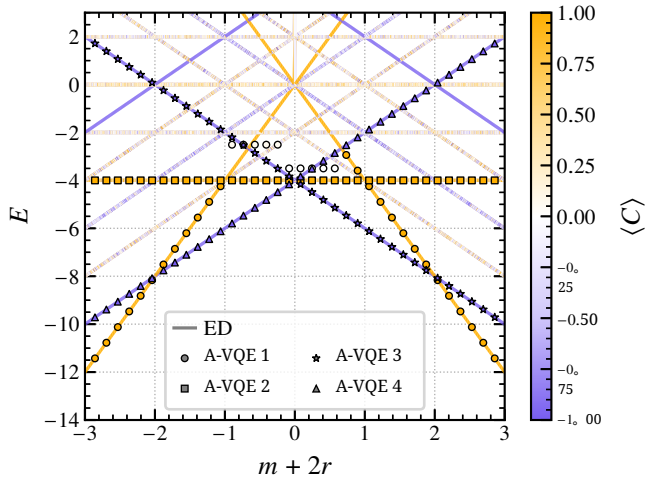


图 5. 能量随平移质量的变化，其中线条和数据点的颜色表示相应的电荷共轭期望值。我们展示了通过精确对角化获得的基态、第一激发态和最低能量的更高激发态，以及在 2×2 格点上通过 ADAPT-VQE 获得的最终态。ADAPT-VQE 的阈值参数设为 $\varepsilon = 1\times10^{-3}$和 $\varepsilon_\theta = 1\times10^{-3}$。VQE 子程序使用 SLSQP 作为优化器，在每次 ADAPT-VQE 迭代中设置的迭代上限为$I_{\max} = 20\,000$，目标精度为 $\varepsilon_{\text{opt}} = 1\times10^{-6}$。

首先需要指出的是，C 的方差未显示，因为从以下意义上说它是冗余的：

$$\mathrm{Var}(\mathsf{C}) = \langle\psi|\underbrace{\mathsf{C}^2}_{=\mathbf{1}}|\psi\rangle - \left(\langle\psi|\,\mathsf{C}\,|\psi\rangle\right)^2 = 1 - \langle\mathsf{C}\rangle^2 .$$

因此，接近 ±1的电荷共轭期望值表明，最终态接近电荷共轭本征态。此外，在所考察的整个质量范围内，ADAPT-VQE 2、3 和 4 的哈密顿量最终标准差均达到 $\sigma_H = \mathcal{O}(10^{-4})$，即它们始终收敛到能量本征态，即使该态是激发态也是如此。对于 ADAPT-VQE 1，其标准差显示于图 4 中。

我们首先分析精确对角化（ED）的参考结果。正如预期，基态是电荷共轭的本征态。请注意，我们通过电荷共轭算符对参考态的作用（式 (32)）来固定 C 的相位，而不是像通常做法那样要求基态的本征值为 $+1$。按照这一约定，每个本征值都对应一个特定态，因此基态本征值的变化直接表明具有不同 C 本征值的态之间发生了能级交叉。事实上，基态本征值在 $m+2r=-2$ 和 $m+2r=2$处发生变化。因此，在这些交叉点附近，第一激发态是交叉另一侧基态的延续，因而也为 C 本征态；$m+2r<-1$ 和 $m+2r>1$ 处的情况正是如此。一些更高激发态同样是 C 本征态，不过大多数能级在较大的参数区域内并不具有确定的 C 本征值。这是因为这些能级是简并的，且对角化时只考虑哈密顿量，因此所得态既可能是 C 本征态，也可能是由具有不同本征值的 C 本征态构成的任意叠加态。

ADAPT-VQE 2 是唯一被强制限制在 $\langle\mathsf{C}\rangle=+1$扇区中的运行。如图所示，它从未重构出基态，而是始终收敛到激发态。在参数区域 $-1<m+2r<+1$内，这对应于第一激发态；而对于更大的和更小的平移质量值，这则是更高激发态。该运行可视为第三节 B 中所讨论情形的一个例子，即在达到激发态时过早退出 [47]。

ADAPT-VQE 3 和 4 得出的结果相似但并不等价。两次运行均局限于 $\langle\mathsf{C}\rangle=-1$ 扇区，并重构出在 $m+2r\to-(m+2r)$ 下呈镜像对称的能级。对于 $0<m+2r<2$，ADAPT-VQE 3 重现了基态；而在 $m+2r$ 取较大值时，则重现了第一激发态。相比之下，ADAPT-VQE 4 在 $-2<m+2r<0$ 时重现基态，并在取较小值时重现第一激发态。因此，在两次运行中有一次收敛到更高激发态的所有情况下，另一次都会重构出基态或第一激发态。

我们观察到，所考虑的算符池和初始态的任何组合都无法在质量参数 m的所有取值下重现基态。然而，通过结合图 5 中的不同结果，我们可以观察到，对于质量参数的所有取值，这些组合结果都能重构基态和第一激发态。

具体而言，使用公式（44）的算符池 $P^{(1)}$ 和初始态$|\psi_{0,\ 1}\rangle$（公式（43））重构 $m+2r<-2$ 和 $m+2r>2$ 的基态；使用公式（45）的算符池 $P^{(2)}$ 以及公式（48）和（49）中的初始态$|\psi_{0,\ 2}\rangle$ 和 $|\psi_{0,\ 3}\rangle$，重构 $-2<m+2r<2$ 的基态。

V. 结论

在这项工作中，我们研究了 ADAPT-VQE 在制备 $1+1D$ 晶格场论基态方面的成功能否推广到更高维度。为此，我们确定了该算法的两个一般性限制。首先，如果量子比特哈密顿量是时间-

对称，即在计算基下取实值，并且初始态为实态，则所有取实值的算符池中的算符的梯度恒等为零。此类算符永远不会被选中；如果算符池仅包含此类算符，ADAPT-VQE 将立即终止。这种量子比特级对称性不一定与物理系统的时间反演对称性一致，因为后者还作用于场的旋量分量。其次，每个能量本征态都是能量的驻点，因此一旦制备出激发态，ADAPT-VQE 可能会过早收敛。我们还进一步讨论了将对称性纳入算符池和初始态如何影响算法的收敛。

重新审视文献中的示例后，我们发现，SC-ADAPT-VQE 成功应用于 Schwinger模型 [22]依赖于对算符池施加量子比特层面的时间反演对称性。根据我们的分析，这是 ADAPT-VQE 能够运行的必要条件，而非可有可无的选项。同样的障碍也出现在晶格场论之外，例如我们针对超对称量子力学中提出的一个算符池所展示的情况 [31]。

随后，我们在 $2+1D$中首次将 ADAPT-VQE 应用于晶格场论，即应用于 2×2 晶格上的自由 Wilson 费米子。尽管有质量费米子在$2+1D$中不具备物理时间反演对称性，但从该晶格上的 JWT 得到的量子比特哈密顿量是实值的。因此，ADAPT-VQE 无法重构出 VQE 成功用于到达基态的量子线路，因为其所有算符都是实值的。借助由复值单量子比特和双量子比特算符构成的最小算符池，ADAPT-VQE 能够在远离能级交叉处重构基态，但在接近能级交叉处会收敛到第一激发态，或无法到达接近本征态的状态。将电荷共轭纳入算符池后，可以改善能量本征态的重构效果，但不存在任何单一的算符池与初始态组合，能够在所有质量取值下重现基态。然而，通过结合不同的运行结果，可以在所考察的整个质量范围内重构基态和第一激发态。

这些发现为将 ADAPT-VQE 应用于超越$1+1D$的晶格场论提供了一些实用指导。在选择算符池之前，应检查量子比特哈密顿量是否为实值；这不仅取决于理论本身，还取决于晶格大小以及费米子到量子比特映射的相位约定。如果是实值的，那么算符池必须包含虚部不为零的算符，最好是纯虚算符，从而使波函数保持为实数。由于 ADAPT-VQE 的收敛并不能保证已经达到基态，因此应检查最终态，例如通过哈密顿量的方差以及相关对称性的期望值进行检验。最后，对于存在能级交叉的理论，基态所属的对称扇区可能会随参数变化，因此应通过适当的初始态分别针对不同的对称扇区，并将结果进行比较。

通过将 ADAPT-VQE 的局域梯度型选择准则替换为非局域选择准则，可以缓解激发态中的过早收敛问题。一个例子是贪婪无梯度自适应 VQE（GGA-VQE） [48], ：对于算符池中的每个算符，它将能量确定为相应参数的一维函数，并选择使能量达到最低的算符和角度。由于这一准则不依赖当前状态处的梯度，因此原则上可以离开激发本征态等驻点，前提是算符池中包含一个沿某个有限角度方向使能量降低的算符。这使得非局域选择准则成为将自适应变分算法应用于具有能级交叉的晶格场论的一个有前景方向。

未来仍有几个研究方向。在更大的晶格上，伽马矩阵对量子比特哈密顿量的贡献不再相互抵消，因此量子比特哈密顿量的时间反演性质以及对算符池的要求也会发生变化。此外，将电荷共轭直接纳入算符池会导致作用于更多量子比特的算符，而对称性与更大算符的影响进行区分则留待未来研究。最后，将我们的分析扩展到相互作用理论，尤其是 $2+1D$ 和 $3+1D$中的规范理论，并研究这些算法在含噪量子硬件上的性能，也十分重要。

致谢

作者感谢 Emanuele Mendicelli、Emil Otis Rosanowski 和 Sim- ran Singh 富有见地的讨论。本项目由德国研究基金会（DFG，德国研究基金会）资助，属于 CRC 1639 NuMeriQS 项目（编号：511713970）以及德国卓越战略的一部分，并获得卓越集群“Color meets Flavor”（CmF，EXC 3107，编号：533766364）和卓越集群“Mat- ter and Light for Quantum Computing”（ML4Q，EXC 2004/2，编号：390534769）的支持。本研究是高能物理量子计算（QC4HEP）工作组的一部分。作者衷心感谢获准使用由波恩大学托管的 Marvin 集群。

本研究获得勃兰登堡州科学、研究与文化部的经费支持，资助来自量子技术与应用中心（CQTA）。

LAND BRANDENBURG
Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur

我们使用了 AI（Claude Opus 5.5）协助进行语言编辑和绘图脚本编写。所有输出

均由作者检查，作者对本文内容承担全部责任。

附录 A：用费米子模表示的自由 Wilson 哈密顿量

为了将公式（24）中的哈密顿量表示为费米子模 $\Phi(m_x,\ n_y)$ 的形式，我们选择以下伽马矩阵：

$$\begin{aligned}\gamma^0 &= \sigma_z = \left(\gamma^0\right)^\intercal = \left(\gamma^0\right)^*,\\ \gamma^1 &= -\mathrm{i}\sigma_y = -\left(\gamma^1\right)^\intercal = \left(\gamma^1\right)^*,\\ \gamma^2 &= -\mathrm{i}\sigma_x = \left(\gamma^2\right)^\intercal = -\left(\gamma^2\right)^*.\end{aligned} \tag{A1}$$

其中 σ_x、σ_y 和 σ_z 表示泡利矩阵。

将这些代入公式 (24) 可得

$$\begin{aligned}H_{\mathrm{Free}} = \sum_{n_x=0}^{N_x-1}\sum_{n_y=0}^{N_y-1}\Bigg[&-\frac{1}{2}\Big\{ \\ &r\big(B_1(2n_x,n_y)+B_1(2n_x+1,n_y)+B_2(2n_x,n_y)+B_2(2n_x+1,n_y)\big)\\ &+C_1(2n_x+1,n_y)+C_1(2n_x,n_y)+C_2(2n_x+1,n_y)+C_2(2n_x,n_y)+\mathrm{h.c.}\Big\}\\ &+(m+2r)\left(A(2n_x,n_y)+A(2n_x+1,n_y)\right)\Bigg]\\ = \sum_{m_x=0}^{M_x-1}\sum_{n_y=0}^{N_y-1}\Bigg[&(m+2r)\,A(m_x,n_y)\\ &-\frac{1}{2}\Big\{r\big(B_1(m_x,n_y)+B_2(m_x,n_y)\big)+C_1(m_x,n_y)+C_2(m_x,n_y)+\mathrm{h.c.}\Big\}\Bigg],\end{aligned} \tag{A2}$$

其中我们定义了缩写

$$\begin{aligned}&A(m_x,n_y) \\ &\coloneqq (-1)^{m_x}\Phi^\dagger(m_x,n_y)\Phi(m_x,n_y),\end{aligned} \tag{A3}$$

$$\begin{aligned}&B_1(m_x,n_y) \\ &\coloneqq (-1)^{m_x}\Phi^\dagger(m_x,n_y)\Phi(m_x+2,n_y),\end{aligned} \tag{A4}$$

$$\begin{aligned}&B_2(m_x,n_y) \\ &\coloneqq (-1)^{m_x}\Phi^\dagger(m_x,n_y)\Phi(m_x,n_y+1),\end{aligned} \tag{A5}$$

$$\begin{aligned}&C_1(m_x,n_y) \\ &\coloneqq -\mathrm{i}\Big[\frac{1}{2}\left(1-(-1)^{m_x}\right)\Phi^\dagger(m_x,n_y)\Phi(m_x+1,n_y)\\ &\quad+\frac{1}{2}\left(1+(-1)^{m_x}\right)\Phi^\dagger(m_x,n_y)\Phi(m_x+3,n_y)\Big],\end{aligned} \tag{A6}$$

$$\begin{aligned}&C_2(m_x,n_y) \\ &\coloneqq -\frac{1}{2}\left(1-(-1)^{m_x}\right)\Phi^\dagger(m_x,n_y)\Phi(m_x-1,n_y+1)\\ &\quad+\frac{1}{2}\left(1+(-1)^{m_x}\right)\Phi^\dagger(m_x,n_y)\Phi(m_x+1,n_y+1).\end{aligned} \tag{A7}$$

附录 B：Jordan–Wigner 变换

为了将费米子自由度映射为量子比特，我们使用 JWT。以下关于 JWT 必要性质的推导基于文献 [49]。N 个费米子模的状态可描述为

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N=0}^{1} C_{i_1,\ldots,i_N}\left(\Phi_1^\dagger\right)^{i_1}\ldots\left(\Phi_N^\dagger\right)^{i_N}|\omega\rangle\,,$$

以及反对易关系

$$\left\{\Phi_i,\Phi_j^\dagger\right\}=\delta_{ij}\qquad \{\Phi_i,\Phi_j\}=\left\{\Phi_i^\dagger,\Phi_j^\dagger\right\}=0,$$

参考态 $|\omega\rangle=|0,..,0\rangle$ 定义为满足：

$$\forall j\in\{1,\ldots,N\}:\quad \Phi_j|\omega\rangle=0.$$

这确定了特定的排序约定，因此通过使用识别

$$|i_1,\ldots,i_N\rangle \coloneqq \left(\Phi_1^\dagger\right)^{i_1}\ldots\left(\Phi_N^\dagger\right)^{i_N}|\omega\rangle\,,$$

我们可以切换为使用 N 量子比特来描述特定状态。请注意，这涉及为每个费米子模选择一个相位。现在让我们推导湮灭算符 Φ_k的表示：

$$
\begin{aligned}
\langle j_1,\ldots,j_N|\,\Phi_k\,|i_1,\ldots,i_N\rangle &= \langle\omega|\,\Phi_N^{j_N}\ldots\Phi_1^{j_1}\Phi_k\left(\Phi_1^\dagger\right)^{i_1}\ldots\left(\Phi_N^\dagger\right)^{i_N}|\omega\rangle \\
&= \langle\omega|\,\Phi_N^{j_N}\ldots\Phi_1^{j_1}\delta_{i_k,1}\left(\prod_{n<k}(-1)^{i_n}\right)\left(\Phi_1^\dagger\right)^{i_1}\ldots\left(\Phi_k^\dagger\right)^{0}\ldots\left(\Phi_N^\dagger\right)^{i_N}|\omega\rangle \\
&= \delta_{i_k,1}\left(\prod_{n<k}(-1)^{i_n}\right)\delta_{j_k,0}\cdot\underbrace{\langle\omega|\,\Phi_N^{j_N}\ldots\Phi_k^0\ldots\Phi_1^{j_1}\left(\Phi_1^\dagger\right)^{i_1}\ldots\left(\Phi_k^\dagger\right)^{0}\ldots\left(\Phi_N^\dagger\right)^{i_N}|\omega\rangle}_{\prod_{n\neq k}\delta_{j_n,i_n}} \\
&= \delta_{i_k,1}\left(\prod_{n<k}(-1)^{i_n}\right)\delta_{j_k,0}\prod_{n\neq k}\delta_{j_n,i_n} \\
&= \left(\prod_{n<k}\mathbf{Z}^{(n)}_{j_n,i_n}\right)\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}^{(k)}_{j_k,i_k}\left(\prod_{n>k}\mathbf{1}^{(n)}_{j_n,i_n}\right) \\
&= \left(\prod_{n<k}\mathbf{Z}^{(n)}_{j_n,i_n}\right)\left(\frac{1}{2}(\mathbf{X}+\mathrm{i}\mathbf{Y})\right)^{(k)}_{j_k,i_k}\left(\prod_{n>k}\mathbf{1}^{(n)}_{j_n,i_n}\right).
\end{aligned}
\tag{B1}
$$

总而言之，我们确定了：

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_{i_1,\ldots,i_N=0}^{1} C_{i_1,\ldots,i_N}\,|i_1,\ldots,i_N\rangle\,, \\
\Phi_k &= \left(\bigotimes_{n<k}\mathbf{Z}^{(n)}\right)\otimes\left(\frac{1}{2}(\mathbf{X}+\mathrm{i}\mathbf{Y})\right)^{(k)}\otimes\left(\bigotimes_{n>k}\mathbf{1}^{(n)}\right), \\
\Phi_k^\dagger &= \left(\bigotimes_{n<k}\mathbf{Z}^{(n)}\right)\otimes\left(\frac{1}{2}(\mathbf{X}-\mathrm{i}\mathbf{Y})\right)^{(k)}\otimes\left(\bigotimes_{n>k}\mathbf{1}^{(n)}\right).
\end{aligned}
$$

附录 C：数值实现

该代码可在 [50], 获取，并采用模块化方式实现。这意味着可以轻松扩展它，通过实现分别继承自 BaseHamiltonian 和 BaseSolver 的新类，以适应不同的物理模型和算法。自由Wilson费米子模拟所需的函数和定义已在 FreeWilson2D 类中实现。该类还负责将式（29）和式（30）显式代入式（A2）。

精确对角化算法已在 ED 类中实现。该实现使用了 scipy [51] 的稀疏线性代数子模块。VQE 算法已在 VQE 类中实现。对于优化器，我们使用 scipy [51] 提供的实现。ADAPT-VQE算法已在 AdaptVQE 类中实现。该实现还使用了以下 Python 软件包：Qiskit [42], scipy [51],numpy [52], sympy [53] 以及 h5py [54]。此外，绘图使用 matplotlib [55] 完成。

[1] J. B. Kogut 和 L. Susskind，《威尔逊格点规范理论的哈密顿量表述》，《物理评论D》**11**，395 1975( )。[2] A. Di Meglio *et al.*，《高能物理的量子计算：现状与挑战》，PRX Quantum **5**，037001 (2024)，arXiv:2307.03236 [量子物理学]。[3] L. Funcke、T. Hartung、K. Jansen 和 S. K¨uhn，《晶格场论的量子计算综述》，PoS **LATTICE2022**，228 (2023)，arXiv:2302.00467 [hep-lat]。[4] C. W. Bauer、Z. Davoudi、A. B. Balantekin、T. Bhat-tacharya、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. Lukin、Y. Meurice、C. Monroe、B. Nachman、G. Pagano、J. Preskill、E. Ri-naldi、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，高能物理量子模拟，PRX Quantum**4**，027001（2023）。[5] C. W. Bauer、Z. Davoudi、N. Klco 和 M. J. Savage，基本粒子与力的量子模拟，Nature Reviews Physics **5**，420（2023）。[6] Z. Davoudi，迈向自然界规范理论的量子计算，The European Physical Journal Special Topics **235**，3847（2026）。[7] J. Preskill，NISQ时代及以后的量子计算，Quantum **2**，79（2018），arXiv:1801.00862 [quant- ph]。[8] A. Peruzzo、J. McClean、P. Shadbolt、M.-H. Yung、X.-Q. Zhou、P. J. Love、A. Aspuru-Guzik 和 J. L. O'Brien，光子量子处理器上的变分本征值求解器，

器，Nature Commun.

5, 4213 2014 1304 3061 ( ),

[ ]

arXiv: 。quant-ph。[9] J. R. McClean、J. Romero、R. Babbush 和 A. Aspuru-Guzik，变分混合量子-经典算法理论，New J. Phys. 18，023023（2016），arXiv:1509.04279 [quant-ph]。[10] J. Tilly *et al.*，变分量子本征求解器：方法与最佳实践综述，Phys. Rept. 986，1 2022 2111（ ），arXiv: 。05176 [quant-ph]。[11] D. Koch、B. Martin、S. Patel、L. Wessing 和 P. M. Alsing，在 IBM 的 20 量子比特量子计算机上展示算法设计中的 NISQ时代挑战，AIP Adv. 10，095101（2020），arXiv:2003.01009 [quant- ph]。[12] M. Urbanek、B. Nachman、V. R. Pascuzzi、A. He、C. W. Bauer 和 W. A. de Jong，利用噪声估计电路缓解量子计算机上的退极化噪声，Phys. Rev. Lett.

127, 270502 2021 2103 08591 ( ),

[ ]

arXiv: 。quant-ph。[13] Y. Zhang、L. Cincio、C. F. A. Negre、P. Czarnik、P. J. Coles、P. M. Anisimov、S. M. Mniszewski、S. Tretiak 和 P. A. Dub，降低电路复杂度的变分量子本征求解器，npj Quantum Inf. 8，96（2022），arXiv:2106.07619 [quant-ph]。[14] Z. Cai、R. Babbush、S. C. Benjamin、S. E ndo、W. J. Huggins、Y. Li、J. R. McClean 和 T. E. O'Brien，量子误差缓解，Rev. Mod. Phys. 95，045005（2023），arXiv:2210.00921 [quant-ph]。[15] M. G. Algaba、P. V. Sriluckshmy、M. Leib 和 F. ˇSimkovic IV，方格网量子硬件上的低深度费米子系统模拟，Quantum 8，1327 2024 2302（ ），arXiv: 。01862 [quant-ph]。[16] A. Carreras、R. Or´us 和 D. Casanova，使用变分量子本征求解器进行分子能量估计时量子硬件的局限性，Phys. Chem. Chem. Phys. 28，2834（2026），arXiv:2506.03995 [quant-ph]。[17] J. R. McClean、S. Boixo、V. N. Smelyanskiy、R. Babbush 和 H. Neven，量子神经网络训练景观中的贫瘠高原，Nature Commun. 9，4812（2018），arXiv:1803.11173 [quant-ph]。[18] S. Wang、E. Fontana、M. Cerezo、K. Sharma、A. Sone、L. Cincio 和 P. J. Coles，变分量子算法中的噪声诱导的贫瘠高原，Nature Commun. 12，6961 2021 2007（ ），arXiv: 。14384 [quant-ph]。[19] A. Arrasmith、M. Cerezo、P. Czarnik、L. Cincio 和 P. J. Coles，贫瘠高原对无梯度优化的影响，Quantum

5, 558 2021 2011 12245 ( ),

[ ]

arXiv: 。quant-ph。[20] E. R. Anschuetz 和 B. T. Kiani，量子变分算法充斥着陷阱，Nature Commun. 13，7760（2022），arXiv:2205.05786 [quant-ph]。[21] H. R. Grimsley、S. E. Economou、E. Barnes 和 N. J. Mayhall，用于在量子计算机上进行精确分子模拟的自适应变分算法，Nature Commun. 10，3007（2019），arXiv:1812.11173 [quant-ph]。[22] R. C. Farrell、M. Illa、A. N. Ciavarella 和 M. J. Savage，在数字量子计算机上制备基态的可扩展量子线路：100 个量子比特上的 Schwinger模型真空态，PRX Quantum 5，020315（2024），arXiv:2308.04481 [quant-ph]。[23] R. C. Farrell、M. Illa、A. N. Ciavarella 和 M. J. Savage，使用 112 109 个量子比特模拟 Schwinger模型中的强子动力学，Phys. Rev. D（2024）114510。[24]S. R. Sharpe，《根化交错费米子：好、坏还是丑？》，PoS LAT2006，022（2006），arXiv:hep- lat/0610094。[25] K. G. Wilson，《夸克禁闭》，《物理评论D》10，2445（1974）。[26] H. J. Rothe，*Lattice Gauge Theories : An Introduction (Fourth Edition)* 43 ，第 *Lattice Gauge Theories : An Introduction (Fourth Edition)* 43 卷（World Scientific Publishing Company，2012）。[27] C. Gattringer 和 C. B. Lang，*Quantum chromodynamics on the lattice* 788 2010 ，第 *Quantum chromodynamics on the lattice* 788 2010 卷（Springer，柏林）。[28] M. F. L. Golterman、K. Jansen 和 D. B. Kaplan，《晶格上的陈–西蒙斯流与手征费米子》，Phys. Lett. B 301，219（1993），arXiv:hep-lat/9209003。[29] L. W. Bertels、H. R. Grimsley、S. E. Economou、E. Barnes 和 N. J. Mayhall*，《对称性破缺减缓ADAPT变分量子本征求解器的收敛》，J. Chem. Theor. Comput. 18，6656（2022），arXiv:2207.03063 [量子物理学]。[30] K. S. Shirali、K. Sherbert、Y. Chen、A. Florio、A. Weich- selbaum、R. D. Pisarski 和 S. E. Economou，《破缺还是不破缺：自适应量子模拟中的对称性——以Schwinger模型为例》，（2025），arXiv:2510.03083 [量子物理学]。[31] J. Kerfoot、E. Mendicelli 和 D. Schaich，《超对称量子力学的量子变分方法》，（2025），arXiv:2510.26506 [量子物理学]。[32] I. D. Kivlichan、J. McClean、N. Wiebe、C. Gidney、A. Aspuru-Guzik、G. K.-L. Chan 和 R. Babbush，《以线性深度和连通性进行电子结构的量子模拟》，Phys. Rev. Lett. 120，110501（2018），arXiv:1711.04789 [量子物理学]。[33] M. J. D. Powell，《一种通过线性插值建模目标函数和约束函数的直接搜索优化方法》，载于 *Advances in Optimization and Numerical Analysis* 1994 （Springer Netherlands）。[34] T. M. Ragonneau，*Model-Based Derivative-Free Optimization Methods and Software* ，博士论文，香港理工大学应用数学系，香港，中国（2022）。[35] D. Kraft，*A Software Package for Sequential Quadratic Programming* 1988 （DFVLR 科学报告，）。[36] H. L. Tang、V. O. Shkolnikov、G. S. Barron、H. R. Grimsley、N. J. Mayhall、E. Barnes 和 S. E. Economou，《Qubit-ADAPT-VQE：在量子处理器上构建硬件高效Ans¨atze的自适应算法》，PRX Quantum 2，020310（2021），arXiv:1911.10205 [量子物理学]。[37] H. R. Grimsley、G. S. Barron、E. Barnes、S. E. Economou 和 N. J. Mayhall，《自适应的、针对问题定制的变分量子本征求解器缓解粗糙参数景观和贫瘠高原》，npj Quantum Inf. 9，24（2023），arXiv:2204.07179 [量子物理学]。[38] 此讨论假设噪声水平可以忽略。对于实际的含噪硬件，必须向代价算符中添加额外的惩罚项，如第IV B节针对电荷算符 Q所示。[39] P. Jordan 和 E. P. Wigner，《关于泡利不相容原理》，Z. Phys. 47，631（1928）。[40] S. Weinberg，*The Quantum theory of fields. Vol. 1: Foundations* 2005 （剑桥大学出版社）。[41] 我们通过数值验证了 $\lambda_Q = 100$ 足以将具有有限电荷的态推到低能谱之外。[42] A. Javadi-Abhari *et al.*，《使用Qiskit进行量子计算》，（2024）

’ arXiv:2405.08810 [量子物理学]。

[43] S. Schuster、S. K¨uhn、L. Funcke、T. Hartung、M.-O. Pleinert、J. von Zanthier 和 K. Jansen，利用基于测量和量子门的量子计算研究存在化学势时三味Schwinger模型的相图，《物理评论D》**109**，114508 2024 2311（），arXiv：。14825 [hep-lat]。[44] 尽管仅凭这一点还不够，正如第三节A的第三条陈述中所讨论的那样。[45] 另一种选择是采用第四节C 1中提到的对JWT重新赋相位的方法。[46] 由于第四节A 2中所采用的相位约定，该本征值被 not 固定为 $+1$ ，但它也可以取 $\alpha_{C、\Omega} = \pm 1$这些值。此外，算符池的表达能力 $P^{(2)}$ 可能不足以捕获具有与该算符池相同的电荷共轭本征值的低能量本征态，因为该算符池不包含单量子比特、双量子比特或三量子比特算符及相应的量子门。

[48] C. Feniou、M. Hassan、B. Claudon、A. Courtat、O. Adjoua、Y. Maday 和 J.-P. Piquemal，《噪声中等规模量子计算机上的贪婪无梯度自适应变分量子算法》，Sci. Rep. **15**，18689（2025），arXiv:2306.17159 [quant-ph]。[49] F. Verstraete 和 J. I. Cirac，《将费米子的局域哈密顿量映射为自旋的局域哈密顿量》，J. Stat. Mech. **0509**，P09012（2005），arXiv:cond-mat/0508353。[50] N. Dichter，《硕士论文模拟源代码》。[51] P. Virtanen *et al.*，《SciPy 1.0——Python科学计算基础算法》，Nature Meth. **17**，261 2020 1907（），arXiv: .10121 [cs.MS]。[52] C. R. Harris *et al.*，《使用 NumPy 进行数组编程》，Nature **585**，357（2020），arXiv:2006.10256 [cs.MS]。[53] A. Meurer *et al.*，《SymPy：Python 符号计算》，PeerJ Comput. Sci. **3**，e103（2017）。[54] A. Collette *et al.*，《Python 的 HDF5》。[55] J. D. Hunter，《Matplotlib：二维图形环境》，Comput. Sci. Eng. **9**，90（2007）。