

基于量子机器学习的压缩量子模拟 *

郑昕博¹⁾ 徐卓越¹⁾ 陈昱全¹⁾ 李兆凯^{1)2)3)†} 彭新华¹⁾²⁾³⁾

1) (中国科学技术大学物理学院, 合肥 230026)

2) (中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心, 合肥 230026)

3) (合肥国家实验室, 合肥 230088)

量子模拟利用可控的量子系统来模拟一个难以用经典计算机处理的复杂多体量子系统, 以应对随多体系统规模指数增长的计算复杂度。本文研究了一种基于量子机器学习的压缩量子模拟方案, 通过利用参数化量子线路构建量子自编码器, 学习高维希尔伯特空间中量子绝热演化的低维等效表示, 并在低维空间中高保真地重构绝热演化过程以实现压缩量子模拟。本文以 9 量子比特二维横场伊辛模型的量子相变检测问题为例, 使用 2 量子比特系统对其进行压缩量子模拟, 制备基态并测量磁涨落和能量等物理量。结果表明, 该方案能在低维希尔伯特空间中高精度复现量子相变行为, 所得基态能量的相对误差不超过 2.1%。本研究为在资源有限的量子设备上模拟复杂物理过程提供了新的思路, 推动了量子模拟与机器学习的交叉融合。

关键词: 量子模拟, 量子机器学习, 压缩量子模拟, 量子绝热演化

PACS: 03.67.-a, 03.67.Ac, 03.67.Lx

1 引言

量子模拟^[1-3]是量子信息科学的重要研究方向之一, 其核心研究思路是利用可控性良好的量子信息系统来模拟和研究难以直接操控或尚不可获得的复杂量子系统。量子模拟可以有效应对经典计算机在模拟复杂量子系统时所面临的参数量随系统规模呈指数增长的“指数墙”问题^[4]。在过去数十年中, 量子模拟

† 通信作者. E-mail: zkli@ustc.edu.cn

* 国家科技重大专项 (批准号: 2024ZD0302000, 2021ZD0303205) 和国家自然科学基金 (批准号: 92165108, 12261160569) 资助的课题.

已广泛应用于凝聚态物理^[5-7]，高能物理^[8-10]，宇宙学^[11,12]以及其他众多领域^[13,14]。多体量子系统的量子相变^[15]是量子模拟的重要研究对象之一。量子相变描述了量子系统在其哈密顿量参数连续变化时，基态性质发生显著变化的物理现象，一直是物理学研究的热点问题之一^[16-18]。与单一基态的模拟不同，量子相变的模拟要求系统在哈密顿量参数连续变化的过程中，沿基态路径实现相应的演化，从而刻画系统在临界点附近的性质变化，这对量子模拟方案提出了更高要求。

针对此类由哈密顿量参数连续变化所驱动的基态性质演化追踪问题，量子绝热演化提供了一种有效的模拟手段。其理论基础为量子绝热定理^[19]：若系统的哈密顿量随时间变化足够缓慢，一个初始处于基态的系统将始终保持在瞬时哈密顿量对应的瞬时基态上。利用这一特性，通过缓慢调节量子系统哈密顿量的参数，使系统在演化过程中保持在瞬时基态，便可刻画基态性质随哈密顿量变化的演化规律，并在临界点处观测到量子相变所导致的基态性质突变。绝热演化这种追踪基态性质变化的能力，使其成为实验研究量子相变的重要方法^[20,21]。然而，在使用绝热演化模拟多体量子系统的过程中，需要将复杂多体哈密顿量的演化算符编译成量子模拟器上可执行的线路。这会引入大量的量子逻辑门操作，显著增加量子线路的深度，导致高昂的实验代价。除此之外，在模拟多体量子系统时，由于多体纠缠态容易受到环境噪声的影响。这不仅对量子硬件上的可操纵量子比特数量提出了要求，还需要量子模拟系统具有稳定性和低噪声的特性。因此，在当前量子硬件上，通过量子门序列实现任意多体量子系统高保真地绝热演化模拟通常较为困难。

针对如何在资源受限的量子设备上实现复杂量子系统的有效模拟，已有研究从不同角度提出了降低量子资源需求的方法。一个具有代表性的方向是利用最近邻匹配门线路所具有的特殊代数结构，将宽度为 n 的最近邻匹配门线路等价地转化为仅需 $\mathcal{O}(\log n)$ 个量子比特的普通量子线路。该方法在保持输出概率分布一致的意义下，实现了对匹配门计算过程的压缩量子模拟，从而显著降低了模拟此类线路所需的量子比特数^[22-25]。另一种降低量子比特需求的重要方法是基于对称性的量子比特削减方法。完整希尔伯特空间将依据对称性分解为多个的本征子空间，而具体物理问题仅发生在对称性确定的一个子空间内，因此模拟时无需保留完整量子比特空间^[26,27]。从编码角度看，改变哈密顿量及量子态的表示方式也是一种降低量子比特需求的思路。例如，当轨道数较大而粒子数固定时，可采用一次量子化表示替代常见的二次量子化表示，以降低系统寄存器所需的量子比特数^[28]。在二次量子化框架内，也可通过紧凑编码或量子比特高效编码减少量子比特数。此类方法不再为所有可能的模式或自旋轨道分配独立量子比特，而是利用占据模式稀疏、粒子数守恒等特性，仅编码实际被占据的模式或物理相关的电子组态^[29,30]。除此之外，对于某些模型，其对应的局域时间演化门在特定运算下具有封闭性：多个门操作可以通过等价变换重新组合，变

换后的结果仍属于同一类门，仅门参数发生更新。基于这一性质，可对时间演化过程进行等价的线路重构，从而将量子线路深度压缩至与演化时间无关、且仅随系统规模线性增长的形式^[31-33]。上述方法均体现了利用低维有效空间保留目标物理信息的思想，但其适用性通常依赖于哈密顿量的特定形式、或对称性等已知的先验解析知识。因此这类方法对系统形式和物理先验具有较强依赖，在未知或缺乏明显解析结构的多体系统中往往难以直接适用。为应对这一挑战，我们提出一种数据驱动的量子机器学习方法。该方法无需事先解析获得系统的有效子空间，而是直接从多体系统的已知基态中提取与绝热动力学过程相关的低维有效表示，构建能够近似描述系统主要物理行为的压缩子空间，以降低对量子硬件资源的需求。

在本文中，我们提出压缩绝热演化方法（Compressed ADiabatic Evolution, CADE）以在低维空间中实现绝热演化过程的模拟。该方法利用量子自编码器^[34,35]将高维希尔伯特空间中的绝热演化路径映射至低维希尔伯特空间，并在此基础上构建原系统哈密顿量、密度矩阵以及观测量的等效低维表示，进而实现在低维希尔伯特空间中对高维量子绝热演化的量子模拟。本文以 9 量子比特二维横场伊辛模型的绝热量子相变过程为例，通过“试探-迭代”的逐级压缩将该绝热演化过程的有效表示压缩至 2 量子比特系统中，并在该压缩表示中制备基态、测量磁涨落和能量等关键物理量。测量结果表明，该等效表示在压缩后的低维希尔伯特空间中高精度地呈现了量子相变行为，且低维等效哈密顿量与高维哈密顿量之间的基态能量相对误差不超过 2.1%，有力证明了本压缩量子模拟方法的实用性。本研究为在资源有限的量子设备上高效实现大规模量子系统的模拟提供了可能的解决方案。

2 基于量子自编码器的绝热演化压缩方法

2.1 量子绝热演化理论

在 n 量子比特系统中，量子绝热演化是使量子系统从初始哈密顿量 H_0 的基态 $|\psi^n(0)\rangle$ 开始，向目标哈密顿量 H_1 的基态 $|\psi^n(1)\rangle$ 演化。在本文中，我们使用上标 n 来表示这是 n 量子比特系统中的量子态或密度矩阵。在实际研究中，绝热演化过程使用如下形式的含参哈密顿量：

$$H(g) = (1-g)H_0 + gH_1. \quad (1)$$

其中 $g = l/G$ 为归一化参数， $l = 1, 2, \dots, G$ ， G 表示该绝热演化的总步数。系统演化至第 l 步的状态可表示为：

$$|\psi^n(l/G)\rangle = U(l) \cdots U(2)U(1) |\psi^n(0)\rangle. \quad (2)$$

其中 $U(l) = \exp(-iH(l/G)\frac{T}{G})$ 为时间演化算符。

在量子相变检测任务中，核心在于追踪序参量 O 的期望值随参数 g 的演化规律。基于上述离散化过程，对第 l 步演化后的系统状态进行测量，通过遍历全部 G 步演化，即可绘制观测量期望值的演化轨迹：

$$\langle O \rangle_g = \langle \psi^n(g) | O | \psi^n(g) \rangle. \quad (3)$$

当期望值发生显著变化时，对应的参数即为量子相变临界点 g_c 。因此，实现压缩量子模拟的核心在于对上述演化路径中的所有瞬时基态 $|\psi^n(g)\rangle$ 进行整体压缩。量子自编码器是常用的量子态压缩模型之一，本文将将其应用场景拓展至绝热演化过程，以有限的训练集实现对整条绝热演化路径上所有量子态的高效压缩。

2.2 量子自编码器

自然界中的数据通常具有显著的冗余性。经典自编码器^[36]通过神经网络训练，在此过程中剔除原本数据中的冗余部分，将高维数据编码为低维数据，实现了数据的压缩。受此启发，这一思想已被推广至量子领域，量子自编码器则是一种用于压缩量子态的工具。

对于 n 量子比特输入量子态 $\rho^n(g) = |\psi^n(g)\rangle \langle \psi^n(g)|$ ，量子自编码器通过参数化幺正编码器 $U_e(\theta)$ （其中 θ 为可调参数）将量子信息映射到两个子系统中：包含 $n-m$ 个量子比特的参考子系统 A ，以及包含 m 个量子比特的压缩子系统 S 。若对于给定的输入量子态，编码后的量子态近似为直积态 $|0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)} \otimes \rho^m(g)$ ，即参考子系统 A 处于与输入无关的固定参考态 $|0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)}$ ，则认为编码器将与输入相关的信息压缩并转移至压缩子系统 S 中。此时，压缩子系统 S 中的约化密度矩阵

$$\rho^m(g) = \text{Tr}_A(U_e(\theta)\rho^n(g)U_e^\dagger(\theta)) \quad (4)$$

即为原始量子态的低维有效表示。

基于此目标，可依据参考子系统 A 中的实际量子态 $\rho^{n-m}(g) = \text{Tr}_S(U_e(\theta)\rho^n(g)U_e^\dagger(\theta))$ 与参考态 $|0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)}$ 之间的保真度损失来定义损失函数以衡量编码器压缩量子态的能力：

$$\mathcal{L}(\theta) = 1 - F(\rho^{n-m}(g), |0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)}). \quad (5)$$

其中 $F(\rho_1, \rho_2) = \text{Tr}(\sqrt{\sqrt{\rho_1}\rho_2\sqrt{\rho_1}})^2$ 表示密度矩阵 ρ_1, ρ_2 之间的保真度。至此，已通过编码器实现了量子态的压缩。

与之相应，解码器则通过将编码器的逆变换 $U_e^\dagger(\theta)$ 作用在参考态与压缩量子态的直积态上，实现对压缩量子态的解码。我们在参考子系统 A 中重新引入初始化为 $|0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)}$ 的量子态，并与压缩量子态

$\rho^m(g)$ 构成直积态, 作用 $U_e^\dagger(\theta)$ 以近似重构出原始输入量子态 $\rho_{\text{dec}}^n(g)$, $F(\rho_{\text{dec}}^n(g), \rho^n(g)) \approx 1$ 。将上述原理推广至包含 K 个量子态的输入集合 $\mathcal{D} = \{\rho_k^n\}_{k=0}^{K-1}$, 整体训练目标即为最小化集合中所有 K 个量子态的平均损失 $\frac{1}{K} \sum_k \mathcal{L}_k(\theta)$, 从而实现对整个数据集的压缩编码。

若存在编码器 $U_e(\theta)$, 可以将训练集 $\mathcal{D}$ 中的任意量子态映射为参考态与 m 比特量子态的直积态, 实现参考子系统 A 与压缩子系统 S 之间的完全解耦, 称此编码器为无损压缩器 $\mathcal{U}_e$ [37], 此时损失函数将收敛至最小值 0。

2.3 基于量子自编码器的绝热演化压缩方法

本文推广了编码器 $U_e(\theta)$ 对离散输入态集合的压缩机制, 使其可用于处理连续的量子动力学过程。在总计 G 步的离散绝热演化路径选取 K 个系统哈密顿量基态构建训练集 $\mathcal{D} = \{|\psi^n(g_k)\rangle \langle \psi^n(g_k)|\}_{k=0}^{K-1}$ 。若绝热路径上的所有瞬时基态 $|\psi^n(g)\rangle$ 均可由训练集线性表示, 则这些态均处于训练集张成的线性空间中。在此条件下, 一旦编码器能够压缩该训练集, 亦可压缩绝热路径上的每一个瞬时基态。

同时, 若训练集中最大线性无关向量的个数不超过子空间 S 的维度 $\text{Dim}(S)$, 则存在一个无损压缩器 $\mathcal{U}_e$, 能够实现对绝热演化路径的无损压缩。在满足上述条件时, 编码器对离散量子态的压缩能力可扩展至连续绝热演化路径, 从而将完整的绝热演化路径编码至低维表示空间。

在无损压缩器 $\mathcal{U}_e$ 的作用下, 基态密度矩阵 $\rho^n(g) = |\psi^n(g)\rangle \langle \psi^n(g)|$ 被映射为 $\mathcal{U}_e \rho^n(g) \mathcal{U}_e^\dagger = |0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)} \otimes \rho^m(g)$ 。哈密顿量 $H(g)$ 的基态能量 $E_0(g) = \text{Tr}(\rho^n(g)H(g))$ 可表示为:

$$\begin{aligned} E_0(g) &= \text{Tr}(\mathcal{U}_e \rho^n(g) \mathcal{U}_e^\dagger \mathcal{U}_e H(g) \mathcal{U}_e^\dagger) \\ &= \text{Tr}\left(|0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)} \otimes \rho^m(g) \mathcal{U}_e H(g) \mathcal{U}_e^\dagger\right) \\ &= \text{Tr}_S\left(\text{Tr}_A\left((\mathbb{I}^{\otimes(n-m)} \otimes \rho^m(g))(|0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)} \otimes \mathbb{I}^{\otimes m}) \mathcal{U}_e H(g) \mathcal{U}_e^\dagger\right)\right) \\ &= \text{Tr}_S\left(\rho^m(g) \text{Tr}_A\left(|0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)} \otimes \mathbb{I}^{\otimes m} \mathcal{U}_e H(g) \mathcal{U}_e^\dagger\right)\right). \end{aligned} \quad (6)$$

使用 P 表示投影算符 $|0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)} \otimes \mathbb{I}^{\otimes m}$, 由此, 压缩子系统 S 内的等效哈密顿量 $\tilde{H}(g)$ 可表示为:

$$\tilde{H}(g) = \text{Tr}_A(P \mathcal{U}_e H(g) \mathcal{U}_e^\dagger). \quad (7)$$

因此, 若存在无损压缩器, 则在压缩子系统 S 中, 等效哈密顿量 $\tilde{H}(g)$ 在量子态 $\rho^m(g)$ 下的期望值将与哈密顿量 $H(g)$ 的基态能量相同:

$$\text{Tr}(\tilde{H}(g) \rho^m(g)) = \text{Tr}(H(g) \rho^n(g)). \quad (8)$$

$\tilde{H}(g)$ 在数学上等价于 $\mathcal{U}_e H(g) \mathcal{U}_e^\dagger$ 的主子矩阵。依据柯西交错定理，主子矩阵的最小本征值大于等于原矩阵的最小本征值。且由于酉变换不改变系统的本征值谱，因此 $\tilde{H}(g)$ 的基态能量大于等于 $H(g)$ 的基态能量。同时依据变分原理， $\tilde{H}(g)$ 的基态能量小于等于在任意量子态下的期望值。结合此上下界关系，当 $\tilde{H}(g)$ 在一量子态下的期望值恰是 $H(g)$ 的基态能量时，说明该期望值即为 $\tilde{H}(g)$ 的基态能量，相应的量子态 $\rho^m(g)$ 为其基态。

同理，类似等效哈密顿量 $\tilde{H}(g)$ 的推导过程，对于 n 量子比特系统中的观测量 O ，在 m 量子比特压缩子系统 S 中的等效观测量 $\tilde{O}$ 可表示为：

$$\tilde{O} = \text{Tr}_A(P \mathcal{U}_e O \mathcal{U}_e^\dagger). \quad (9)$$

在压缩子系统 S 中对 $\rho^m(g)$ 的测量结果，将等于在 n 量子比特系统中对 $\rho^n(g)$ 的测量结果：

$$\text{Tr}(\tilde{O} \rho^m(g)) = \text{Tr}(O \rho^n(g)). \quad (10)$$

该方法使得高维量子绝热演化的性质，可完全通过低维希尔伯特空间中的演化与测量来研究，无需再依赖高维空间的复杂操作。

CADE 的具体流程如图1所示，包括三个主要部分：首先，通过最小化损失函数训练编码器 $U_e(\theta)$ ；随后，利用该编码器将算符编码到低维希尔伯特空间；最后，在此低维希尔伯特空间中重构绝热演化。

首先，在编码器的训练阶段，编码器的参数 θ 通过最小化以下损失函数获得

$$\mathcal{L}(\theta) = 1 - \frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} F \left(\text{Tr}_S(U_e(\theta) |\psi^n(g_k)\rangle \langle \psi^n(g_k)| U_e^\dagger(\theta)), |0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)} \right). \quad (11)$$

该损失函数中的保真度项表示在经过编码器后，训练集在参考子系统 A 中的量子态坍缩到参考态 $|0\rangle \langle 0|^{\otimes(n-m)}$ 上的概率。若损失函数在优化后逐渐收敛至 0，意味着 n 比特量子态 $|\psi^n(g_k)\rangle$ 的绝大部分信息已经被成功压缩到了由 m 个量子比特组成的压缩子系统 S 中。通过经典的优化算法最小化该损失函数，最终得到一组最优参数 θ^* 。由于在实际训练中往往难以实现理想的无损压缩器 $\mathcal{U}_e$ ，在假定已获得有效压缩的前提下，后续推导中将使用最优参数化编码器 $U_e(\theta^*)$ 代替 $\mathcal{U}_e$ 。

随后利用训练后的编码器将相关算符映射至低维子空间。依照 (7) 式，(9) 式编码等效哈密顿量 $\tilde{H}(g)$ 与等效观测量 $\tilde{O}$ ，两者可使用统一的编码映射进行编码：

$$f(U_e(\theta^*), \cdot) = \text{Tr}_A(P U_e(\theta^*) [\cdot] U_e^\dagger(\theta^*)). \quad (12)$$

考虑到绝热哈密顿量 $H(g)$ 为初始哈密顿量 H_0 和目标哈密顿量 H_1 的线性组合 $H(g) = (1 - g)H_0 + gH_1$ ，利用量子映射操作的线性特性，无需对每一参数下的哈密顿量进行繁琐的逐点编码，而只需分别对

H_0 和 H_1 各进行一次编码:

$$\tilde{H}_{0,1} = \text{Tr}_A(PU_e(\theta^*)H_{0,1}U_e^\dagger(\theta^*)). \quad (13)$$

随后, 直接通过调节参数 g 构造出在压缩子空间 S 中的等效哈密顿量: $\tilde{H}(g) = (1-g)\tilde{H}_0 + g\tilde{H}_1$ 。

完成上述编码操作后, 便可在压缩子系统 S 内重构绝热演化。首先将高维系统的初态 $|\psi^n(0)\rangle$ 输入至优化后的编码器, 压缩子系统 S 的输出量子态即为低维演化的初始状态 $\rho^m(0)$:

$$\rho^m(0) = \text{Tr}_A(U_e(\theta^*)|\psi^n(0)\rangle\langle\psi^n(0)|U_e^\dagger(\theta^*)). \quad (14)$$

利用上一步构造的等效哈密顿量 $\tilde{H}(g)$ 来驱动压缩初态 $\rho^m(0)$ 演化, 保持离散化步长 G 与高维绝热演化相同, 演化后的瞬时基态由下式给出:

$$\rho^m(l/G) = \tilde{U}(l) \cdots \tilde{U}(2)\tilde{U}(1)\rho^m(0)\tilde{U}^\dagger(1)\tilde{U}^\dagger(2) \cdots \tilde{U}^\dagger(l). \quad (15)$$

其中 $\tilde{U}(l) = \exp\left(-i\tilde{H}(l/G)\frac{T}{G}\right)$ 为时间演化算符。

将演化生成的瞬时基态用于观测等效观测量 $\tilde{O}$ 的期望值:

$$\langle\tilde{O}\rangle_g = \text{Tr}\left[\tilde{O}\rho^m(g)\right]. \quad (16)$$

通过对演化过程中的每一步重复执行上述测量, 并遍历全部 G 步演化, 最终可以完整地绘制出观测量在量子绝热演化过程中的变化曲线 $\langle\tilde{O}\rangle_g$ 。当参数化编码器 $U_e(\theta^*)$ 是无损压缩器 $\mathcal{U}_e$ 的良好近似时, 在低维系统中观测得到的期望值演化曲线 $\langle\tilde{O}\rangle_g$ 能够高精度逼近高维系统的基态演化行为曲线 $\langle O\rangle_g$ 。至此, 我们完成了对高维绝热演化过程的有效压缩, 以及在低维希尔伯特空间对物理演化特征的有效重构及测量。

3 二维横场伊辛模型的量子相变模拟研究

3.1 二维横场伊辛模型介绍

本文以量子绝热演化检测二维横场伊辛模型的量子相变为例, 对所提出的压缩绝热演化方案进行了数值仿真验证。该模型描述了方形晶格上自旋之间的相互作用以及自旋与外部横向磁场的耦合作用, 其哈密顿量可表示为:

$$H = -\Gamma \sum_{u=0}^{n-1} X_u - J \sum_{\langle u,v \rangle} Z_u Z_v. \quad (17)$$

其中 X_u, Z_u 为第 u 个自旋的泡利 X, Z 算符, $\langle u, v \rangle$ 表示最近邻自旋对。 $J > 0$ 为自旋-自旋耦合强度, 倾向于使相邻自旋同向排列, 使系统处于铁磁相; Γ 为横向磁场强度, 倾向于使自旋沿横场方向排列, 使系

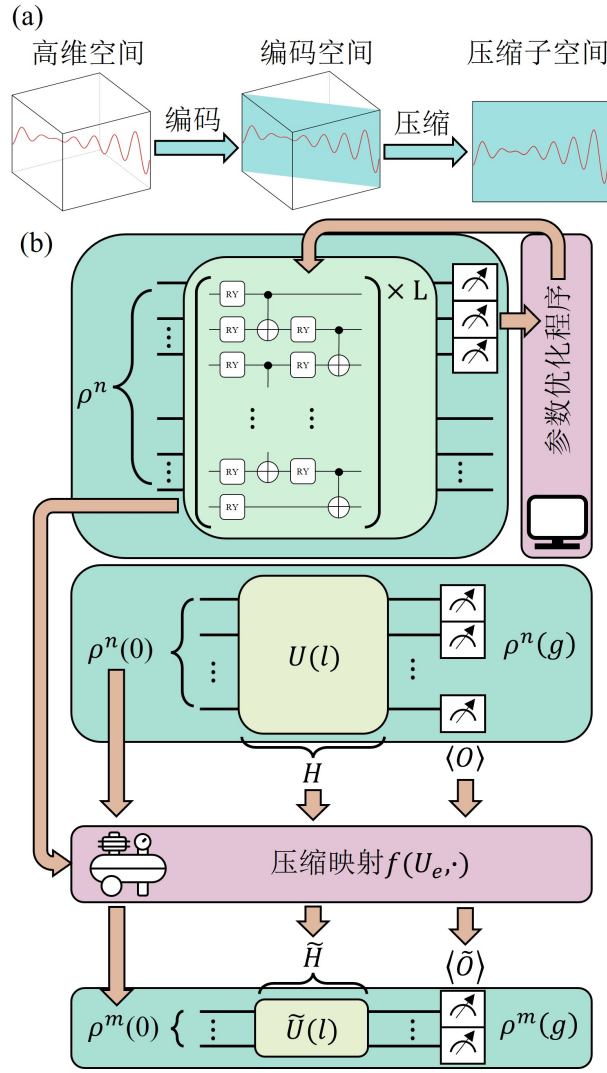


图 1 压缩绝热演化方法 (CADE) 的概念图及具体流程 (a) 该方法通过识别绝热演化所在的低维空间，并构造压缩映射以实现绝热演化的有效降维；(b) 具体流程包括三部分：首先通过参数优化程序训练编码器；随后使用编码器构造压缩映射，并将原始哈密顿量与观测量等压缩至低维空间；最后在低维空间重构绝热演化。

Fig. 1. Conceptual diagram and detailed flowchart of the Compressed Adiabatic Evolution (CADE) method. (a) This method identifies the low-dimensional space where adiabatic evolution happens, and then performs a compression mapping to effectively reduce the dimensions; (b) The flowchart includes three parts: first, train the encoder using a parameter optimization program; then, use the encoder to create a compression mapping to compress operators, such as the Hamiltonian and observables, into the low-dimensional space; and finally, reconstruct the adiabatic evolution in the low-dimensional space.

统处于顺磁相。当相互作用逐渐增强，使 J/Γ 从 0 逐渐增加至临界点 $J/\Gamma \approx 1/3$ 时，系统发生从顺磁相过渡至铁磁相的量子相变，这一现象可以通过基态中磁涨落的峰值位置来观测：

$$\chi = n(\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2). \quad (18)$$

其中 $M = \frac{1}{n} \sum_{u=0}^{n-1} Z_u$ 表示基态在 Z 方向的平均磁化强度。

本文研究了一个总自旋数 $n = 3 \times 3 = 9$ 的二维横场伊辛模型，采用周期性边界条件。令 $H_0 = -\sum_{u=0}^8 X_u$ ， $H_1 = -\sum_{u=0}^8 X_u - \sum_{\langle u,v \rangle} Z_u Z_v$ ，构造绝热哈密顿量 $H(g) = (1-g)H_0 + gH_1$ 。通过精确对角化求解该哈密顿量并获取基态，计算出磁涨落随参数 g 的演化曲线，结果如图2(a) 中蓝线所示。相较于热力学极限情形，在有限尺寸体系中的磁涨落峰的位置会出现一定的偏移。图中磁涨落峰出现在 $g \approx 0.35$ 附近，表明当前体系在该参数区域具有较强的临界响应。该峰位可视为在当前有限尺寸、周期性边界条件及观测量定义下得到的临界点，本研究的核心目标是在低维压缩子空间中高精度地重构此演化曲线。

对于该高维绝热演化过程，总演化时间设定为 $T = 50$ ，总离散步数设定为 $G = 100$ 。系统在时间演化算符 $U(l) = \exp(-iH(l/G)\frac{T}{G})$ 的作用下演化至第 l 步，对应的绝热演化瞬时基态 $|\psi^9(l/G)\rangle = U(l) \cdots U(1) |\psi^9(0)\rangle$ 被用于测量磁涨落。遍历全部 G 个绝热演化步后，即可得到磁涨落在整个演化过程中的取值。

3.2 二维横场伊辛模型的压缩绝热模拟

本实例采用的编码器变分拟设如图 1(b) 中所示，其基础线路块包括 4 层：第 1、3 层为作用于所有量子比特的，绕 y 轴旋转角度为 ϕ 的单量子比特门 $RY(\phi) = e^{-iY\frac{\phi}{2}}$ ，第 3 层可精简首尾量子比特上的旋转门以消除连续旋转操作带来的参数冗余；第 2、4 层为两量子比特纠缠门 CNOT，第 2 层由第 $2i$ 量子比特控制第 $2i+1$ 量子比特，第 4 层由第 $2i+1$ 量子比特控制第 $2i+2$ 量子比特， $i = 0, 1, 2, 3$ 。完整编码器由该基础线路块重复 $L = 8$ 次构成。本实例的目标是使用尽可能少的量子比特来模拟 $n = 9$ 量子比特系统。考虑到直接压缩至更低维空间时参数优化难度较高，本文采用“试探-迭代”逐级压缩方式：首先将 9 量子比特绝热演化路径压缩至作为试探的 4 量子比特中间表示，随后继续训练编码器完成 4 量子比特至 3 量子比特、3 量子比特至 2 量子比特的压缩。当压缩子空间为 4、3 和 2 量子比特时，训练损失基本保持稳定；进一步压缩至 1 量子比特时，训练损失则明显增大，因此后续压缩模拟采用 2 量子比特压缩空间。训练集选取 $g = 0, 0.5, 1$ 三个参数点处哈密顿量的基态构造， $\{|\psi^9(0)\rangle, |\psi^9(0.5)\rangle, |\psi^9(1)\rangle\}$ 。采

用 (11) 式所定义的损失函数：

$$\mathcal{L}(\theta) = 1 - \frac{1}{3} \sum_{k=0}^2 F \left(\text{Tr}_S(U_e(\theta) |\psi^9(g_k)\rangle \langle \psi^9(g_k)| U_e^\dagger(\theta)), |0\rangle \langle 0|^{\otimes 7} \right). \quad (19)$$

经典优化器使用 Adam^[38] 算法进行优化, 结合参数位移法则^[39] 计算梯度。在逐级训练过程后, 损失函数最终收敛至 0.008, 表示训练集在子系统 A 中的量子态与 $|0\rangle^{\otimes 7}$ 态的平均保真度达 0.992, 已将训练集的绝大部分信息压缩至 2 量子比特子空间 S 内。将此时的参数记为 θ^* , 相应的编码器为最优参数化编码器 $U_e(\theta^*)$ 。

在完成训练后, 根据 (12) 式构建等效哈密顿量 $\tilde{H}(g) = f(U_e(\theta^*), H(g))$ 与等效观测量 $|\tilde{M}| = f(U_e(\theta^*), |M|)$, $\tilde{M}^2 = f(U_e(\theta^*), M^2)$ 。在压缩子系统 S 中采用与原系统相同的演化步数 $G = 100$ 与单步演化时长 T/G , 相应的时间演化算符为 $\tilde{U}(l) = \exp(-i\tilde{H}(l/G) \frac{T}{G})$, 并按照 (15) 式在压缩子系统 S 中进行绝热演化, 获得相应的量子态 $\rho^2(g)$ 。最终依据 (16) 式对瞬时基态测量 $|\tilde{M}|$ 与 $\tilde{M}^2$ 的期望值, 从而得到磁涨落的变化曲线, 如图2(a) 橘线所示。该曲线展示了在低维空间中所重构的等效绝热演化观测结果, 其在 $g \approx 0.35$ 处呈现出显著峰值, 与精确解高度吻合, 表明本方法成功实现了对高维量子相变过程的有效模拟。

本文采用均方根误差 (RMSE) 与决定系数 (R^2) 作为量化指标, 定量评估 CADE 性能与误差, 其计算公式为：

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{G_s} \sum_{j=1}^{G_s} (\hat{\chi}_j - \chi_j)^2} \quad (20)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{j=1}^{G_s} (\hat{\chi}_j - \chi_j)^2}{\sum_{j=1}^{G_s} (\chi_j - \bar{\chi})^2}. \quad (21)$$

其中 $\hat{\chi}_j$ 为 CADE 的第 j 个数据点, χ_j 为精确解的第 j 个数据点, $\bar{\chi}$ 表示精确解的平均值。定量分析表明, 2 量子比特 CADE 方法重构曲线的均方根误差为 0.046, 相对于精确解数据变化跨度 ($[0.068, 0.797]$), 该误差占比仅为 6%。同时决定系数为 0.962, 表明本方法具备较高的重建精度。

除了观测量演化曲线外, 本研究还深入考察了 CADE 在压缩系统中的其他物理指标, 包括等效哈密顿量的基态能量相对误差与重构量子态保真度。通过对 2 量子比特哈密顿量 $\tilde{H}(g)$ 进行对角化, 计算其基态能量 $\tilde{E}_0(g)$, 与 9 量子比特哈密顿量的精确基态能量 $E_0(g)$ 求相对误差, $\delta(g) = \left| \frac{E_0(g) - \tilde{E}_0(g)}{E_0(g)} \right|$ 。结果如图2(b) 中蓝色实线所示, 最大相对误差仅 2.05%, 表明等效哈密顿量有效地保持了系统的基态能量。同时, 我们还进一步计算了 9 量子比特系统的低维能谱, 并将 CADE 方法所得能量与目标系统的基态、第一激发态及第二激发态能量进行比较, 结果如图 2(c) 所示。可以看到, CADE 方法所得能量在整个参数区间内均能够很好地跟随 9 量子比特目标系统基态能量的变化趋势, 表明其并未偏离至更高激发态, 能够

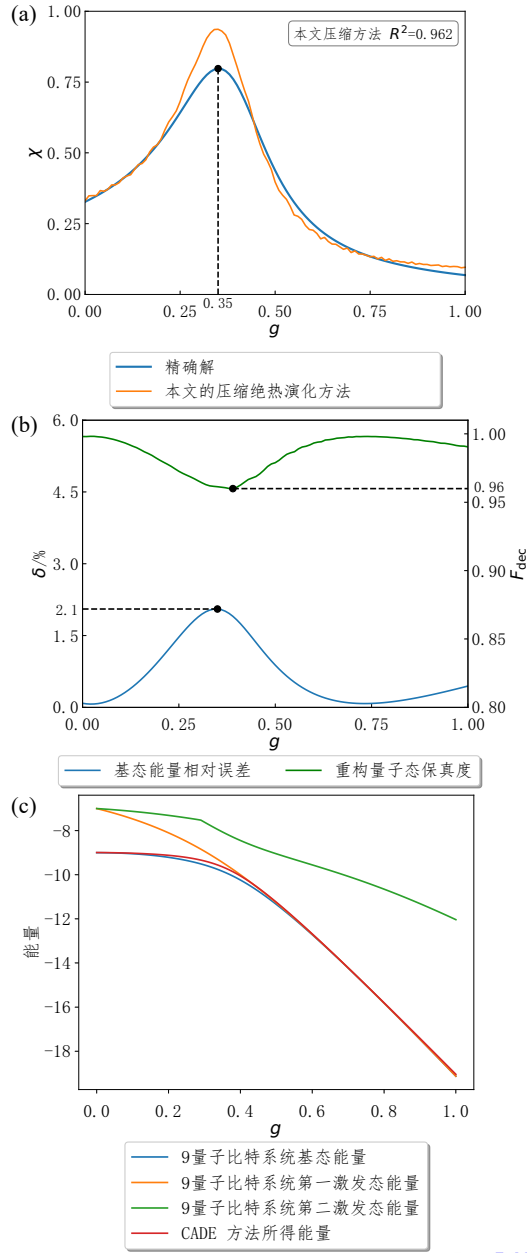


图 2 通过磁涨落观测量子相变的结果及 CADE 性能分析。(a)CADE 方法下磁涨落的测量结果与精确解的对比；(b) 压缩子空间内的基态能量相对误差与重构绝热演化量子态保真度评估；(c) 9 量子比特系统低能谱与 CADE 方法所得能量的比较。

Fig. 2. Results of observing quantum phase transitions through magnetic fluctuations, and CADE performance analysis. (a) Comparison of magnetic fluctuation measurement results, using CADE, against the exact solution; (b) The relative error of ground state energy within the compressed subspace and the fidelity of the reconstructed adiabatic evolution quantum state; (c) Comparison between the low-energy spectrum of the 9-qubit system and the energy obtained by the CADE method.

有效反映目标系统基态能量随参数 g 的演化行为。进一步地，在 9 量子比特横场 Ising 哈密顿量的 2 量子比特压缩表示中，其对应的 Pauli 展开仅包含 9 个 Pauli 基算符项，相较于原表示的 27 项 Pauli 基算符，实现等效压缩哈密顿量演化的难度也会低于原始哈密顿量。

此外，将压缩子空间 S 内经绝热演化得到的密度矩阵 $\rho^2(g)$ ，进行解码并映射回高维希尔伯特空间，得到解码态 $\rho_{\text{dec}}^9(g) = U_e^\dagger(\theta^*)(|0\rangle\langle 0|^{\otimes} \otimes \rho^2(g))U_e(\theta^*)$ ，计算 $\rho_{\text{dec}}^9(g)$ 与 9 量子比特系统精确基态之间的保真度 $F_{\text{dec}} = F(\rho_{\text{dec}}^9(g), |\psi^9(g)\rangle\langle\psi^9(g)|)$ ，如图 2(b) 中绿线所示。在整个演化过程中，量子态保真度的最低值为 0.96，证明了 CADE 在模拟绝热过程中重构量子态的能力。

3.3 误差来源分析

本实例中的误差主要源于以下三部分：编码器训练过程损失函数并未完全收敛至零导致的压缩误差；训练集样本不足，无法线性表示绝热路径中所有瞬时基态导致的代表性误差；离散化绝热演化所引入的非绝热误差。

压缩误差可采用构造无损压缩器的方法量化。先对训练集进行正交化，得到一组正交量子态 $\{|f_i\rangle\}_{i=0}^2$ ，使用这组量子态构造其等权叠加的密度矩阵 $\rho_f = \frac{1}{3}(|f_0\rangle\langle f_0| + |f_1\rangle\langle f_1| + |f_2\rangle\langle f_2|)$ ，对该密度矩阵对角化 $\rho_f = D_f V_f D_f^\dagger$ ，可得其本征值矩阵 $V_f = \text{diag}(1/3, 1/3, 1/3, 0, \dots, 0)$ 与本征向量矩阵 D_f 。由于 V_f 可视作 $\frac{1}{3}(|0\dots 00\rangle\langle 0\dots 00| + |0\dots 01\rangle\langle 0\dots 01| + |0\dots 10\rangle\langle 0\dots 10|)$ ，这三个量子态均可表示为参考态 $|0\rangle\langle 0|^{\otimes 7}$ 与 2 比特量子态的直积，因此在幺正变换 $D_f^\dagger$ 的作用下， ρ_f 将被完全压缩进子空间 S ，故可令无损压缩器 $\mathcal{U}_e = D_f^\dagger$ 。以 $\mathcal{U}_e$ 替代通过训练得到的编码器 $U_e(\theta^*)$ 执行哈密顿量与观测量的编码，据此可得无压缩损失的理想结果，如图 3(a) 中的绿线所示。在实现对 3 个训练集样本的无损压缩时，其与精确解间的均方根误差 0.025，相对于目标数据的总变化跨度，该误差占比约为 3%。我们利用量子费舍尔信息定量刻画了压缩过程对参数 g 相关信息的保留程度。结果表明，在有限尺寸临界点附近，压缩前后量子费舍尔信息的相对差别为 1%，说明压缩后的状态仍能有效保留临界信息，并实现对有限尺寸临界点的有效识别。

代表性误差与训练集的选取密切相关。前文中假定了训练集能够线性表示绝热路径上的所有瞬时基态。然而在实际情况下，部分瞬时基态仍可能包含训练集空间之外的分量，从而引入线性表示误差。为刻画这一偏差，对于绝热路径上的任一瞬时基态，我们将其分解为训练集空间内的分量与其补空间上的分量。以瞬时基态在训练集补空间中的投影概率，即线性无关部分的占比定义为采样误差。进一步地，我们将绝热路径中瞬时基态中这一占比的最大值定义为代表性误差。代表性误差越接近 0，说明训练集越能够

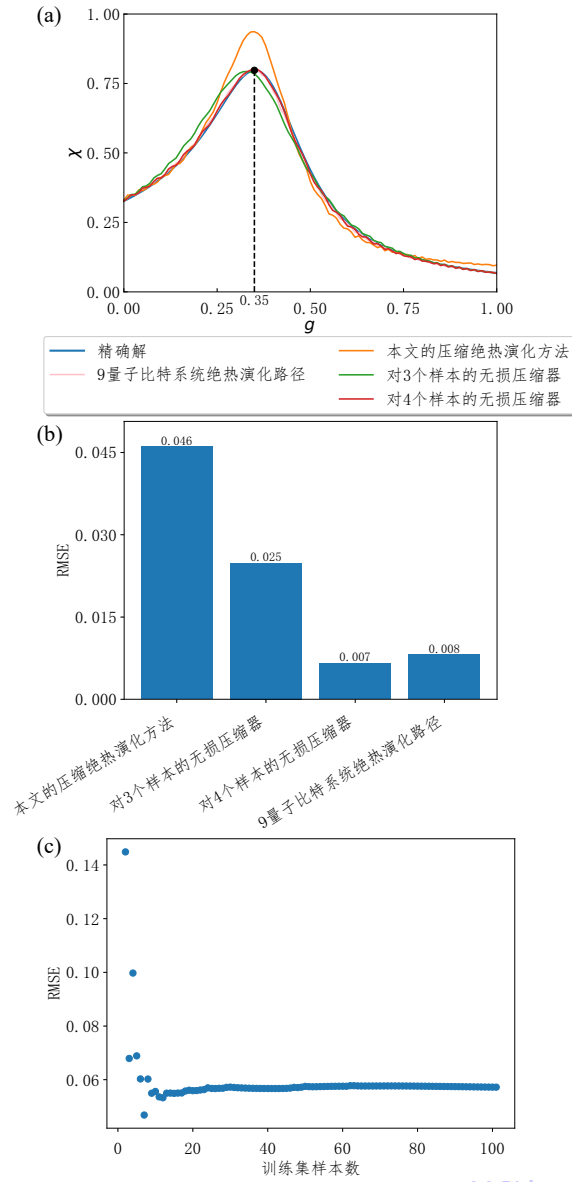


图 3 主要误差来源分析 (a) 不同误差来源对磁涨落曲线的影响及其均方根误差表征。(b) 不同训练样本数对重构精度的影响

Fig. 3. Analysis of the main sources of error.(a)The impact of different error sources on the magnetic fluctuation curve, and their contributions quantified by Root Mean Square Error.(b)Effects of Training Sample Size on Reconstruction Accuracy

完整重构绝热路径；反之，则说明瞬时基态中仍有较大比例的成分无法由训练集线性重构。为进一步观察训练样本数对重构结果的影响，本文补充比较了不同训练集规模下的压缩重构效果。我们通过训练一个将 9 量子比特系统压缩至 2 量子比特系统的量子自编码器，用于定性分析样本数变化带来的影响趋势。训练集规模从仅包含绝热演化路径两端量子态的 2 个样本，逐步增加至包含整条离散绝热路径上全部量子态的 101 个样本，训练样本均通过在参数区间 $g \in [0, 1]$ 上均匀采样相应参数点处的量子态得到。结果如图3(b)所示。当训练集仅包含 2 个样本时，重构误差相对较大，说明此时训练样本明显不足。随着训练样本数增加，重构误差迅速下降，并进入相对稳定区域，表明此时训练集已能够有效表示绝热路径中的主要低维信息。随后，进一步增加训练样本数并未继续显著降低 RMSE，反而表现出缓慢上升的趋势。这表明对于本文所研究的有限尺寸模型和当前训练设置而言，少量代表性训练态已经能够提供描述绝热演化路径所需的主要信息，继续增加样本数所带来的新增信息有限，而优化目标中需要同时拟合的训练态数量增加，反而可能提高参数优化难度，导致重构误差的提高。在本文中，我们通过增加采样数 K 来扩充训练集，随着采样数的增加，训练集张成的子空间对绝热路径的覆盖更加充分，瞬时基态中无法被训练集线性表示的占比减少，代表性误差因此逐渐减小。由于最终的 2 量子比特压缩空间最多可无损容纳 4 个线性无关训练态，本文构建了对应于 4 个训练态的无损压缩器，作为 2 量子比特容量允许条件下的理想参照。结果如图3(a)中红线所示，该无损压缩参照的代表性误差为 10^{-4} ，RMSE 为 0.007，在精确数据变化跨度中的相对占比约为 1%，说明在 2 量子比特容量允许的有效子空间内，本方法能够较好地反映真实的绝热演化过程。

此外，我们独立评估了在高维空间中所设计的绝热演化路径的性能。对于哈密顿量 $H(g)$ 的瞬时本征态，基态与第 j 个激发态之间的定量绝热条件为 $C_j(g) = \left| \frac{\langle \psi_j^n(g) | \dot{H}(g) | \psi_0^n(g) \rangle}{[E_j(g) - E_0(g)]^2} \right|$ 。其中， $|\psi_j^n(g)\rangle$ 为哈密顿量 $H(g)$ 在参数 g 下的第 j 个激发态， $E_j(g)$ 为相应的第 j 激发态能量， $\dot{H}(g)$ 表示哈密顿量对演化时间的导数。若对相关低能激发态均有 $C_j(g) \ll 1$ ，则系统在该演化路径下可认为较好地满足绝热近似。在本实例中，我们沿 $g = 0$ 至 $g = 1$ 的绝热路径，对前 10 个低能激发态对应的 $C_j(g)$ 进行了数值计算。结果表明，在整个演化区间内，所有相关 $C_j(g)$ 均保持在较小范围内，其最大值约为 0.03。这表明所设计的绝热路径能够较好地满足定量绝热条件，从而使系统在演化过程中基本保持在瞬时基态。图3(a) 中粉线展示了 9 量子比特系统在所设计的绝热演化路径下，磁涨落的观测结果。非绝热效应的贡献可通过直接计算 9 量子比特系统绝热路径中磁涨落观测值与精确解之间的均方根误差来量化，其值为 0.008。

图3(a) 汇总分析了上述的各结果。从本实例的实际模拟结果，到对训练集无损压缩结果，再到对绝热路径无损压缩结果，随着将 CADE 方法中的误差依次去除，模拟结果与精确解之间的均方根误差逐渐减

小，对高维量子绝热演化的重构精度逐步提升。最终，在存在对绝热路径的无损压缩器时，本方法可有效地重构高维绝热演化过程。此外，所设计的高维绝热路径与精确解之间极小的误差说明其能有效地反映其量子相变过程，因此影响本实例主要误差来源为编码器的不完美压缩与训练集代表性不足。

4 讨论

本文的数值验证主要基于 9 量子比特二维横场伊辛模型，但具备向更大规模系统拓展的潜力，主要体现在以下两个方面。一方面，对于许多具有量子晶格模型而言，其基态或低能态受到面积律纠缠等物理约束，与基态性质相关的主要信息往往集中在完整希尔伯特空间中的一个低维有效子空间内^[40]。因此，对于这类物理体系而言，可用于压缩表征基态主要特征的有效子空间通常是存在的。另一方面，本文方法所涉及的参数化量子线路可以通过设计合理的线路结构和代价函数来提高可训练性。已有工作展示了在高达 100 量子比特体系中的有效优化过程^[41]，因此可有效训练的量子自编码器也是可以构造的，这进一步支持了本文方法向更大规模系统推广的可行性。

5 结论

本文提出一种基于量子自编码器的绝热演化过程压缩方案。该方案通过将高维希尔伯特空间中的绝热过程映射至低维希尔伯特空间，从而能够在小规模量子模拟器上，实现对大规模量子多体系统的模拟与研究。在针对二维横场伊辛模型的数值实验中，量子自编码器能够有效地压缩量子绝热演化过程，成功在 2 量子比特系统中等效实现了 9 量子比特系统的绝热演化过程。在我们的模拟中，等效哈密顿量的基态能量与精确解之间的最大相对误差不超过 2.1%，重构量子态的保真度不低于 0.96。本方法在小系统中正确复现了原系统中磁涨落的变化曲线，与精确解之间的 R^2 大于 0.962，观测到在该有限尺寸体系下的临界点。本研究使在现有中等规模量子设备上模拟更为复杂的量子绝热过程成为可能，为量子模拟的进一步应用打开了新的路径。

参考文献

- [1] Buluta I, Nori F 2009 *Science* **326** 108
- [2] Feynman R P 1982 *Int. J. Theor. Phys.* **21** 467

- [3] Fan H 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 120301 (in Chinese) [范桁 2018 物理学报 **67** 120301]
- [4] Troyer M, Wiese U J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 170201
- [5] Kiczynski M, Gorman S K, Geng H, Donnelly M B, Chung Y, He Y, Keizer J G, Simmons M Y 2022 *Nature* **606** 694
- [6] Guo S A, Wu Y K, Ye J, Zhang L, Lian W Q, Yao R, Wang Y, Yan R Y, Yi Y J, Xu Y L, Li B W, Hou Y H, Xu Y Z, Guo W X, Zhang C, Qi B X, Zhou Z C, He L, Duan L M 2024 *Nature* **630** 613
- [7] Qin W, Kockum A F, Muñoz C S, Miranowicz A, Nori F 2024 *Phys. Rep.* **1078** 1
- [8] Bañuls M C, Blatt R, Catani J, Celi A, Cirac J I, Dalmonte M, Fallani L, Jansen K, Lewenstein M, Montangero S, Muschik C A, Reznik B, Rico E, Tagliacozzo L, Van Acoleyen K, Verstraete F, Wiese U J, Wingate M, Zakrzewski J, Zoller P 2020 *Eur. Phys. J. D* **74** 165
- [9] Bauer C W, Davoudi Z, Balantekin A B, Bhattacharya T, Carena M, de Jong W A, Draper P, El-Khadra A, Gemelke N, Hanada M, Kharzeev D, Lamm H, Li Y Y, Liu J Y, Lukin M, Meurice Y, Monroe C, Nachman B, Pagano G, Preskill J, Rinaldi E, Roggero A, Santiago D I, Savage M J, Siddiqi I, Siopsis G, Van Zanten D, Wiebe N, Yamauchi Y, Yeter-Aydeniz K, Zorzetti S 2023 *PRX Quantum* **4** 027001
- [10] Li T Y, Xing H X, Zhang D B 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 200303 (in Chinese) [李天胤, 邢宏喜, 张旦波 2023 物理学报 **72** 200303]
- [11] Mocz P, Szasz A 2021 *Astrophys. J.* **910** 29
- [12] Liu J Y, Li Y Z 2021 *Phys. Rev. D* **104** 086013
- [13] Pal S, Bhattacharya M, Dash S, Lee S S, Chakraborty C 2024 *Mol. Biotechnol.* **66** 2201
- [14] Amitrano V, Roggero A, Luchi P, Turro F, Vespucci L, Pederiva F 2023 *Phys. Rev. D* **107** 023007
- [15] Vojta M 2003 *Rep. Prog. Phys.* **66** 2069
- [16] Zhu Z, Sheng D N, Sodemann I 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 097604

- [17] Wang Z Q, Liu Y, Ji C C, Wang J 2023 *Rep. Prog. Phys.* **87** 014502
- [18] Marić V, Giampaolo S M, Franchini F 2020 *Commun. Phys.* **3** 220
- [19] Kato T 1950 *J. Phys. Soc. Jpn.* **5** 435
- [20] Peng X H, Zhang J F, Du J F, Suter D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 140501
- [21] Hatomura T, Takahashi K 2021 *Phys. Rev. A* **103** 012220
- [22] Li Z K, Zhou H, Ju C Y, Chen H W, Zheng W Q, Lu D W, Rong X, Duan C K, Peng X H, Du J F 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 220501
- [23] Jozsa R, Kraus B, Miyake A, Watrous J 2009 *Proc. R. Soc. A* **466** 809
- [24] Jozsa R, Miyake A 2008 *Proc. R. Soc. A* **464** 3089
- [25] Hebenstreit M, Alsina D, Latorre J I, Kraus B 2017 *Phys. Rev. A* **95** 052339
- [26] Bravyi S, Gambetta J M, Mezzacapo A, Temme K 2017 arXiv:1701.08213v1 [quant-ph]
- [27] Setia K, Chen R, Rice J E, Mezzacapo A, Pistoia M, Whitfield J D 2020 *J. Chem. Theory Comput.* **16** 6091
- [28] Georges T N, Bothe M, Sünderhauf C, Berntson B K, Izsák R, Ivanov A V 2025 *npj Quantum Inf.* **11** 55
- [29] Kirby W M, Hadi S, Kreshchuk M, Love P J 2021 *Phys. Rev. A* **104** 042607
- [30] Shee Y, Tsai P K, Hong C L, Cheng H C, Goan H S 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** 023154
- [31] Peng B, Gulania S, Alexeev Y, Govind N 2022 *Phys. Rev. A* **106** 012412
- [32] Camps D, Kökcü E, Bassman Oftelie L, de Jong W A, Kemper A F, Van Beeumen R 2022 *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* **43** 1084
- [33] Bassman Oftelie L, Van Beeumen R, Younis E, Smith E, Iancu C, de Jong W A 2022 *Mater. Theory* **6** 13

- [34] Romero J, Olson J P, Aspuru-Guzik A 2017 *Quantum Sci. Technol.* **2** 045001
- [35] Sun T P, Wu Y C, Guo G P 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 140304 (in Chinese) [孙太平, 吴玉椿, 郭国平 2021 物理学报 **70** 140304]
- [36] Schmidhuber J 2015 *Neural Netw.* **61** 85
- [37] Huang C J, Ma H L, Yin Q, Tang J F, Dong D Y, Chen C L, Xiang G Y, Li C F, Guo G C 2020 *Phys. Rev. A* **102** 032412
- [38] Kingma D P, Ba J 2017 arXiv:1412.6980v9 [cs.LG]
- [39] Wierichs D, Izaac J, Wang C, Lin C Y Y 2022 *Quantum* **6** 677
- [40] Eisert J 2013 arXiv:1308.3318v2 [quant-ph]
- [41] Cerezo M, Sone A, Volkoff T, Cincio L, Coles P J 2021 *Nat. Commun.* **12** 1791

录用稿件，非最终出版稿

Compressed Quantum Simulation via Quantum Machine Learning*

ZHENG Xinbo ¹⁾ XU Zhuoyue ¹⁾ CHEN Yuquan ¹⁾ LI Zhaokai ^{1)2)3)†}
PENG Xinhua ¹⁾²⁾³⁾

1) (*School of Physical Sciences, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

2) (*Hefei National Research Center for Physical Sciences at the Microscale, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

3) (*Hefei National Laboratory, Hefei 230088, China*)

Abstract

Numerically simulating quantum many-body systems is known to be a difficult computational problem, especially for large systems. This difficulty may be overcome through quantum simulation, which uses some controllable quantum system to study another less controllable or accessible quantum system. Compressed quantum simulation can reduce experimental resource requirements, and can provide more resource-efficient implementations of quantum simulations. In this work, we propose a quantum machine learning based compressed quantum simulation scheme. A quantum autoencoder is trained on a small set of representative instantaneous ground states. After training, the autoencoder can map the adiabatic path onto a compressed subspace and yields low-dimensional representations of the Hamiltonians and relevant observables. These effective operators are then used to reconstruct the full adiabatic evolution and evaluate physical quantities entirely within the compressed Hilbert space. As a demonstration, we employ this

* Project supported by the Quantum Science and Technology-National Science and Technology Major Project (Grant Nos. 2024ZD0302000, 2021ZD0303205) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 92165108, 12261160569).

† Corresponding author. E-mail: zkli@ustc.edu.cn

compression scheme to simulate the quantum phase transition of a 9-qubit 2D Ising model on a 2-qubit quantum processor. During training, the loss converged to 0.008, corresponding to a mean fidelity of 0.992 between the reference-subsystem state and its target state. Then we demonstrate that the adiabatic evolution can be realized on a smaller quantum system and the magnetic-fluctuation, whose cusps indicate quantum phase transitions can be measured in the experiment. In this effective evolution, we reproduce the finite-size critical response of the original system near $g \approx 0.35$, with a root-mean-square error of 0.046 and a coefficient of determination $R^2 = 0.962$ relative to the exact calculations. Moreover, the maximum relative error in the ground-state energy is 2.05%, while the fidelity between the reconstructed state and the original 9-qubit ground state remains more than 0.96, confirming that our compressed simulation closely reproduces the original adiabatic evolution. For improved quantum-resource efficiency, the effective two-qubit Hamiltonian contains only nine nontrivial Pauli terms, compared with 27 terms in the original representation, thereby reducing the circuit depth required for digital quantum simulation. These results show that quantum phase transitions in systems larger than the available quantum processor can be investigated experimentally using current quantum technology.

Keywords: Quantum Simulation, Quantum Machine Learning, Compressed Quantum Simulation, Quantum Adiabatic Evolution