Лабораторная работа №3. Реконструкция матрицы плотности методом максимального правдоподобия, оценка адекватности и точности реконструкции

Пусть выполняется набор измерений над состоянием, задаваемым матрицей плотности ρ размерности $d \times d$. l-й результат j-го измерения описывается оператором $P_{j,l}$. Число повторений (время экспозиции) j-го измерения есть n_j. Пусть в результате были получены числа отсчётов $k_{j,l}$. Эти данные могут быть использованы для реконструкции исходного квантового состояния.

Будем выполнять параметризацию матрицы плотности посредством корневого подхода. Для этого введём ранг r ($1 \leq r \leq d$) модели и рассмотрим комплексную матрицу ψ размерности $d \times r$ такую, что $\rho = \psi\psi^\dagger$. Метод максимального правдоподобия для полиномиальной статистики и для статистики Пуассона приводит к тому, что задача реконструкции сводится к решению уравнения правдоподобия

$$I\psi = J(\psi)\psi, \tag{1}$$

где

$$I = \sum_\alpha n_\alpha P_\alpha, \quad J(\psi) = \sum_\alpha \frac{k_\alpha}{p_\alpha(\psi\psi^\dagger)} P_\alpha. \tag{2}$$

Здесь и ниже для удобства мы используем один индекс α, подразумевая совокупность индексов j и l.

Уравнение (1) может быть эффективно решено методом простых итераций:

$$\psi^{(i+1)} = (1-\mu) I^{-1} J(\psi^{(i)})\psi^{(i)} + \mu\psi^{(i)}. \tag{3}$$

Здесь μ есть константа регуляризации. Значение $\mu = 0.5$, как правило, обеспечивает достаточно хорошую сходимость. В качестве нулевого приближения $\psi^{(0)}$ следует брать очищение состояния, полученного в результате псевдо-инверсии с проецированием. Итерационная процедура останавливается, когда

$$\left\| \psi^{(i)} - \psi^{(i-1)} \right\| < \varepsilon \tag{4}$$

с некоторым наперёд заданным значением ε. При выполнении заданий следует использовать $\varepsilon = 10^{-8}$. По окончании итераций получаем матрицу плотности вида

$$\hat{\rho} = \psi\psi^\dagger. \tag{5}$$

Заметим, что в случае пуассоновской статистики нормировка получаемой матрицы плотности отличается от единицы. Её тогда следует спроецировать на нормированную матрицу плотности, используя алгоритм проекции на симплекс из лабораторной работы №2.

Для проверки того, что результат реконструкции находится в соответствии экспериментальным данным, может быть использован критерий согласия Пирсона. Для этого вычислим величину хи-квадрат относительно реконструированной матрицы плотности $\hat{\rho}$:

$$\chi^2 = \sum_\alpha \frac{\left(k_\alpha - p_\alpha(\hat{\rho}) n_\alpha\right)^2}{p_\alpha(\hat{\rho}) n_\alpha}. \tag{6}$$

Данная величина имеет хи-квадрат распределение с ν степенями свободы. Для пуассоновской статистики измерений $\nu = m - 1 - \nu_P$, где m есть общее число измерений, а $\nu_P = (2d - r)r - 1$ — число независимых действительных параметров, описывающих состояние ранга r. Для полиномиальной статистики $\nu = m - m_b - \nu_P$, где m — полное число возможных исходов во всех измерениях, а m_b — число измерительных базисов. Далее вычисляется следующая величина, характеризующая вероятность того, что случайная величина, имеющая хи-квадрат распределение с ν степенями свободы, окажется больше χ^2:

$$\text{p-value} = \Pr[\![X > \chi^2 | \nu]\!]. \tag{7}$$

Для адекватной модели данная величина должна иметь равномерное распределение от 0 до 1.

Потери точности, получаемые в результате томографии, в отсутствии систематических ошибок ограничены снизу величиной, имеющей обобщённое хи-квадрат распределение с параметрами d_j ($j = 1, 2, \ldots, \nu_P$). Расчёт параметров может быть осуществлён с использованием матрицы полной информации

$$H = 2 \sum_j \frac{n_j}{p_j} (P_j \psi)(P_j \psi)^T. \tag{8}$$

Здесь подразумевается, что все величины заданы в действительном Евклидовом пространстве удволенной размерности. Для их нахождения можно воспользоваться следующим преобразованием матрицы состояния:

$$\psi \to \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_r \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \mathrm{Re}(\psi) \\ \mathrm{Im}(\psi) \end{pmatrix}. \tag{9}$$

Здесь ψ_j есть j-й столбец исходной матрицы ψ, отвечающей истинному состоянию. Аналогично, для операторов измерений имеем блочные преобразования

$$P_j \to \underbrace{\begin{pmatrix} P_j & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & P_j \end{pmatrix}}_{r \text{ блоков}} \to \begin{pmatrix} \mathrm{Re}(P_j) & -\mathrm{Im}(P_j) \\ \mathrm{Im}(P_j) & \mathrm{Re}(P_j) \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Нас интересует случай, в котором матрица I из (2) пропорциональна единичный матрице. В этом случае наибольшее собственное значение матрицы H отвечает за нормировку состояния и должно быть отброшено. Отбросив также r^2 нулевых собственных значений, получим набор из ν_P значений h_j. Тогда параметры распределения потерь точности вычисляются согласно формуле

$$d_j = \frac{1}{2h_j}, \quad j = 1, \ldots, \nu_P. \tag{11}$$

На основе этих величин могут быть расчитаны средние потери точности $\langle 1 - F \rangle = \sum_j d_j$, их дисперсия $\sigma^2_{1-F} = 2 \sum_j d_j^2$, а также другие моменты.

Задание

Выберите размерность пространства и протокол томографии согласно своему варианту:

Вариант	d	Протокол
1	2	MUB
2	3	MUB
3	4	MUB
4	3	Случайные базисы
5	4	Случайные базисы
6	2	Грани тетраэдра
7	2	Грани октаэдра

1. Сгенерируйте случайное чистое состояние $|\psi\rangle$ и выполните симуляцию измерений при $n_j = 100$ для всех j.

2. Выполните реконструкцию состояния с использованием корневого подхода и метода максимального правдоподобия. Используйте модели различных рангов r от 1 до d.

3. Для каждого значения r вычислите *fidelity* между реконструированным и истинным состояниями, а также *p-value*. Сравните полученные результаты с результатом реконструкции методом псевдоинверсии с проецированием.

4. Повторите предыдущие шаги 1000 раз, каждый раз генерируя новые статистические данные. Для каждого r постройте гистограммы *fidelity* и *p-value*.

5. Для $r = 1$ сравните ожидаемые средние потери точности и их дисперсии с выборочными значениями.

Указание. Создайте функцию реконструкции состояния методом максимального правдоподобия, которая принимает в качестве аргументов только данные о протоколе измерений и результаты этих измерений, а также матрицу плотности для нулевого приближения.