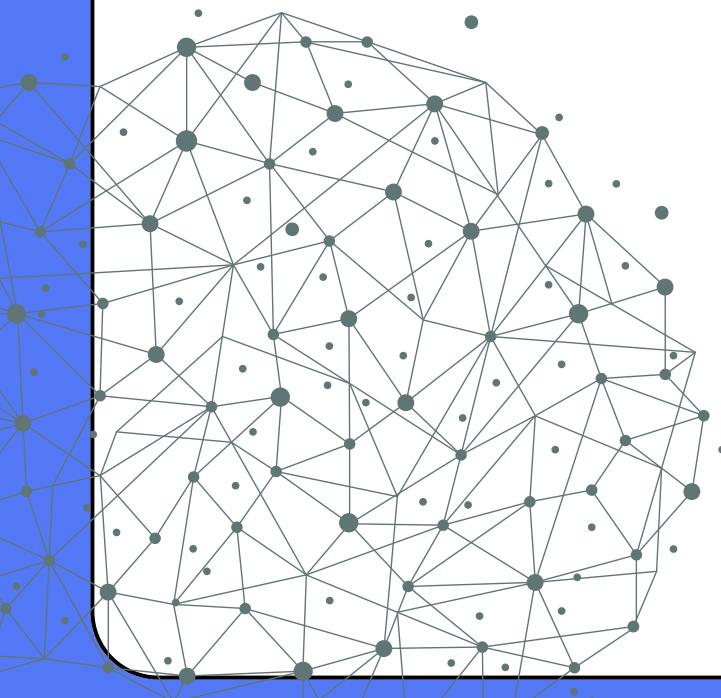
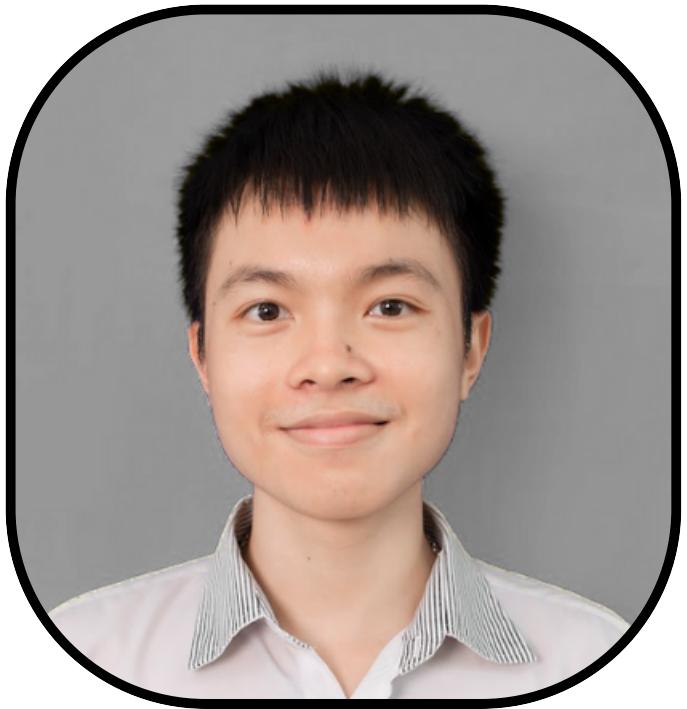


MẠNG NƠ - RON CHO VẬT LÝ NHÌU HẠT LƯỢNG TỬ



GROUP MEMBERS:



Thái Sơn



Hoàng Long



Linh Đan



Minh Đức

MENTOR:

ANH NGUYỄN THẾ QUỲNH
ANH HUỲNH VŨ KHÔI NGUYÊN
ANH TRẦN HỮU BÌNH MINH

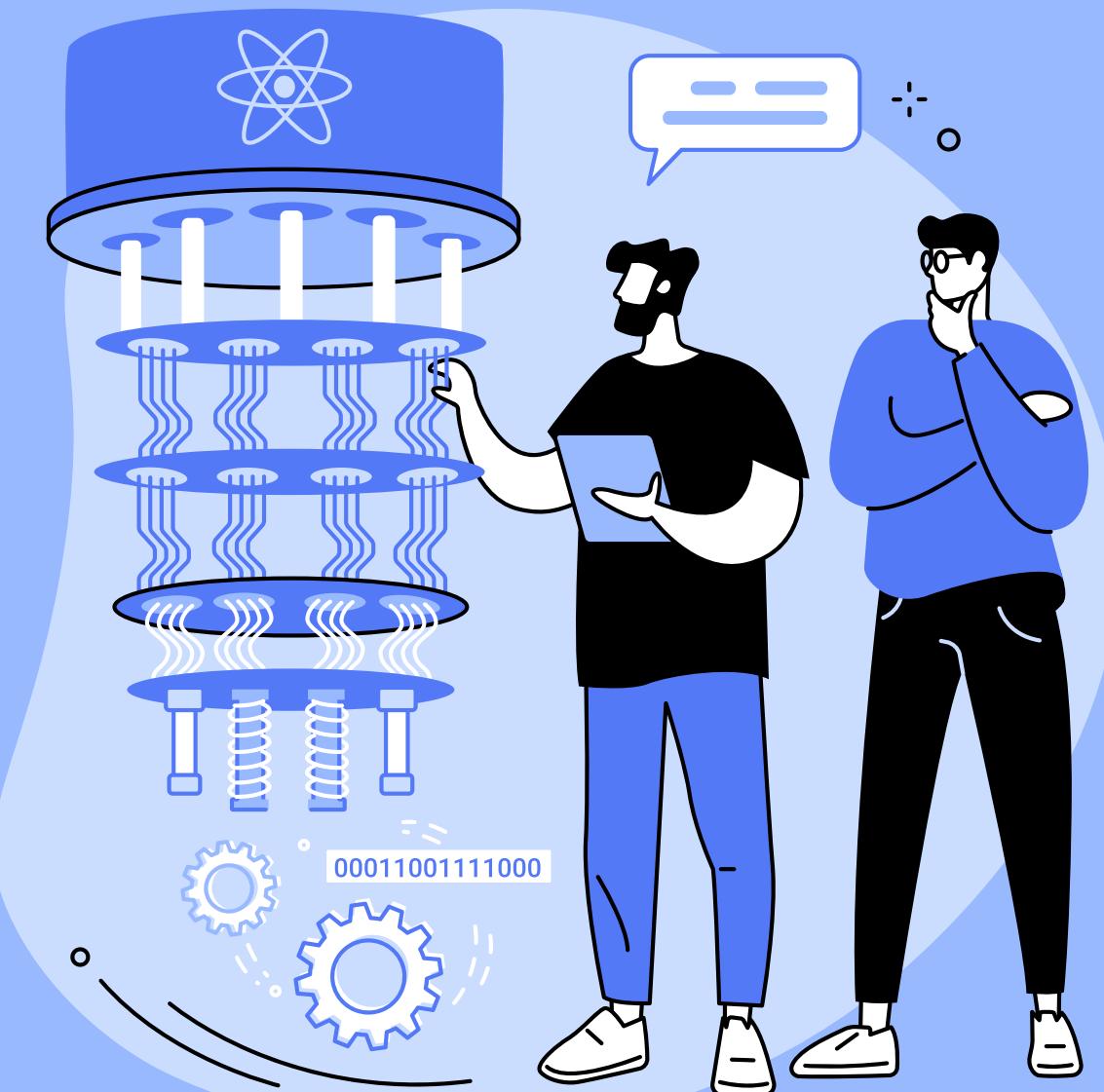


Xuân Hoàng



Hữu Thịnh

MỤC LỤC:



1

GIỚI THIỆU VỀ MÁY TÍNH LƯỢNG TỬ

2

**TRẠNG THÁI LƯỢNG TỬ DÙNG MẠNG
NƠ-RON CHO MÔ HÌNH HEISENBERG**

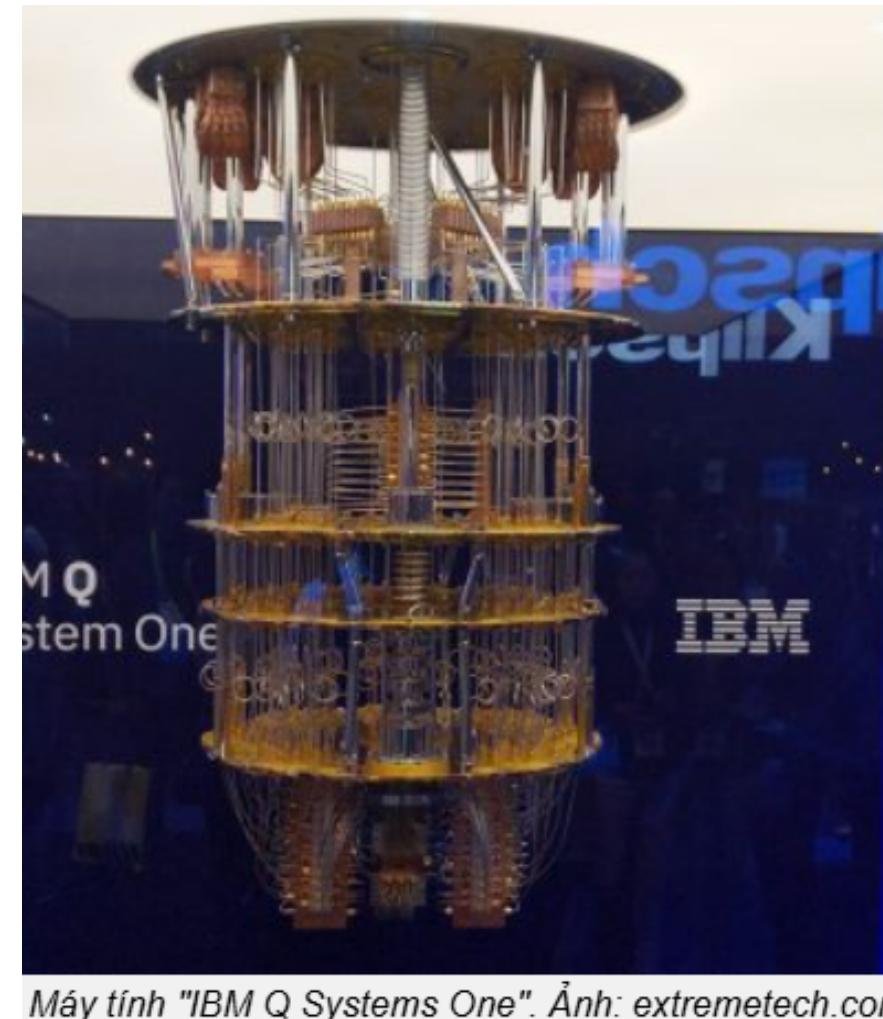
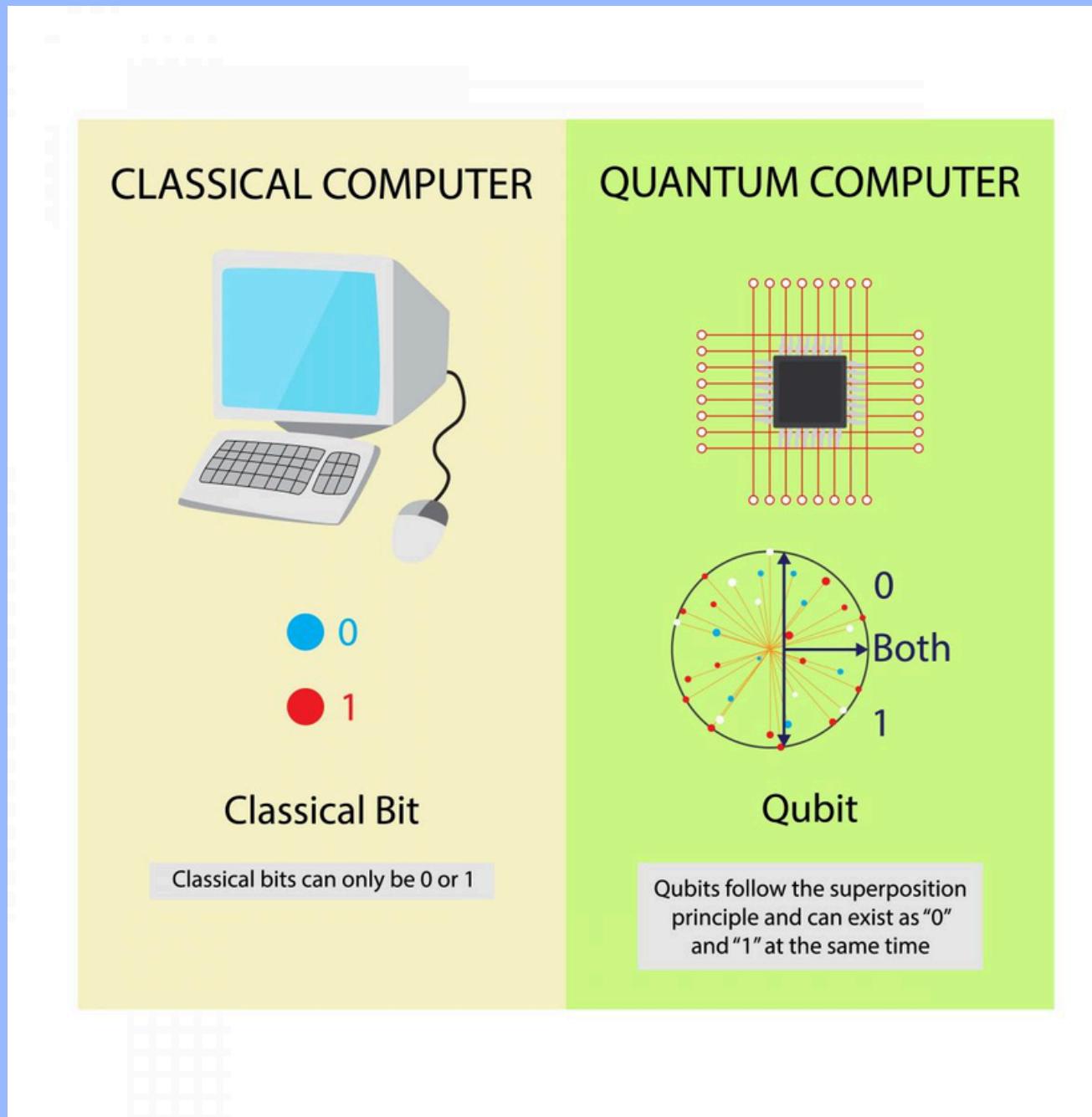
3

KẾT QUẢ

4

**TỔNG QUÁT VÀ ĐỊNH HƯỚNG TƯƠNG
LAI (FUTURE DIRECTIONS)**

WHAT IS QUANTUM COMPUTING ?



Máy tính "IBM Q Systems One". Ảnh: extremetech.com



Quantum computer

Classical Computer

IMPORTANT CONCEPTS AND DEFINITIONS

**Qubit = 2-dim
Complex vector**

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

Tensor product

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}\mathbf{B} & \cdots & a_{1n}\mathbf{B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}\mathbf{B} & \cdots & a_{mn}\mathbf{B} \end{bmatrix},$$

**n qubits = 2^n -dim
Complex vector**

Deutsch algorithm

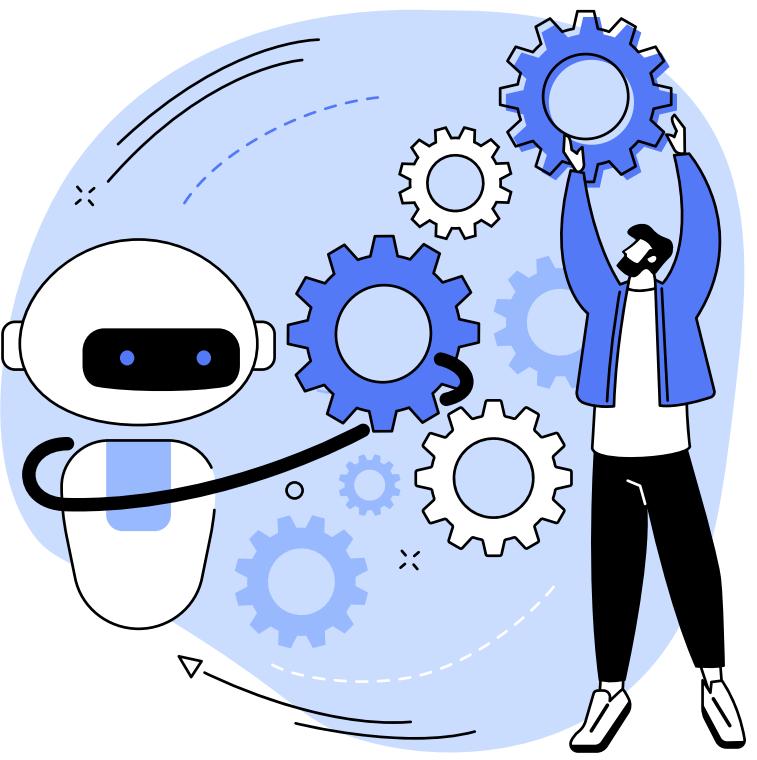
**Shor factoring
algorithm**

etc.

MANY-BODY QUANTUM SYSTEMS

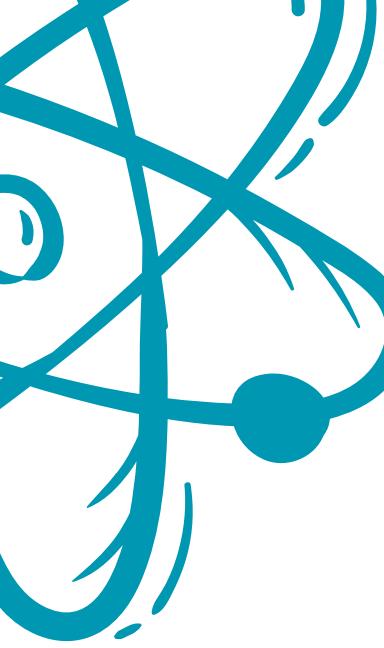
- Là một tập hợp với N bit lượng tử (qubit).
- Năng lượng của hệ được mô tả bởi toán tử Hamiltonian.
- Mô hình Heisenberg là một mô hình quan trọng, giúp giải thích một số hiện tượng trong vật lý.

Vấn đề đặt ra: Tìm năng lượng thấp nhất của mô hình Heisenberg.



$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} (\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j)$$

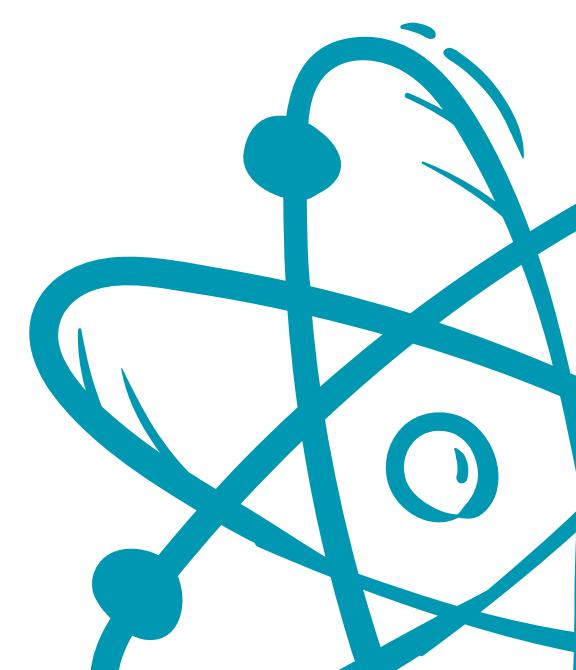




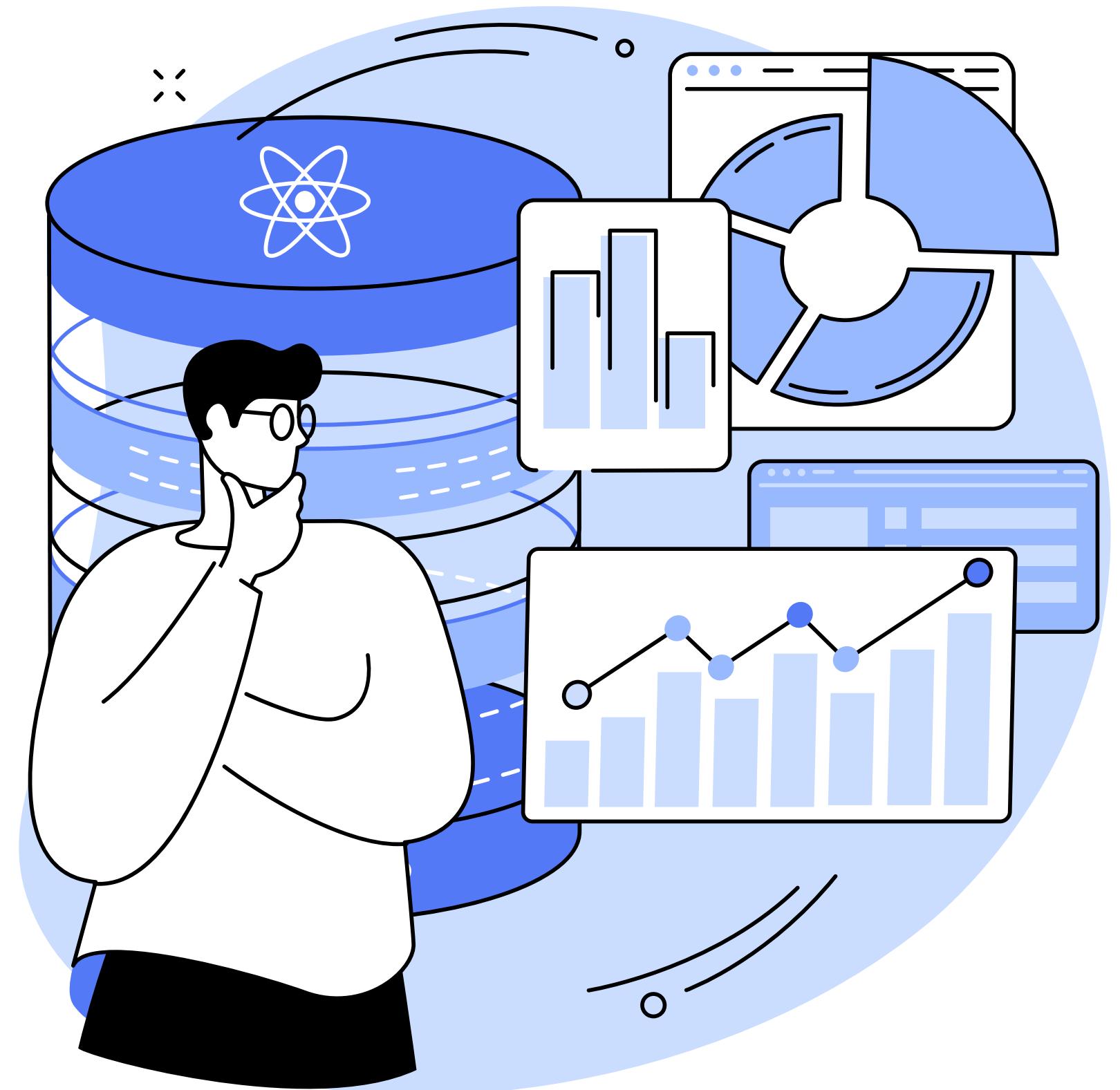
BÀI TOÁN NĂNG LƯỢNG TRẠNG THÁI CƠ BẢN

Ground state energy: $\min_{|\psi\rangle: \||\psi\rangle\|=1} \langle\psi|H|\psi\rangle$

Chéo hóa chính xác (Exact Diagonalization) có độ phức tạp
theo hàm mũ.



TRANG THÁI LƯỢNG TỬ DÙNG MẠNG NƠ-RON CHO MÔ HÌNH HEISENBERG



NHỮNG THỬ THÁCH LIÊN QUAN ĐẾN VẬT LÝ NHIỀU HẠT LƯỢNG TỬ

THỬ THÁCH

- Cần 2^n số để có thể biểu diễn rõ ràng một trạng thái lượng tử.

Các mô hình học máy giúp giải bài toán này như thế nào?

Science

Current Issue

First release paper

HOME > SCIENCE > VOL. 355, NO. 6325 > SOLVING THE QUANTUM MANY-BODY PROBLEM WI

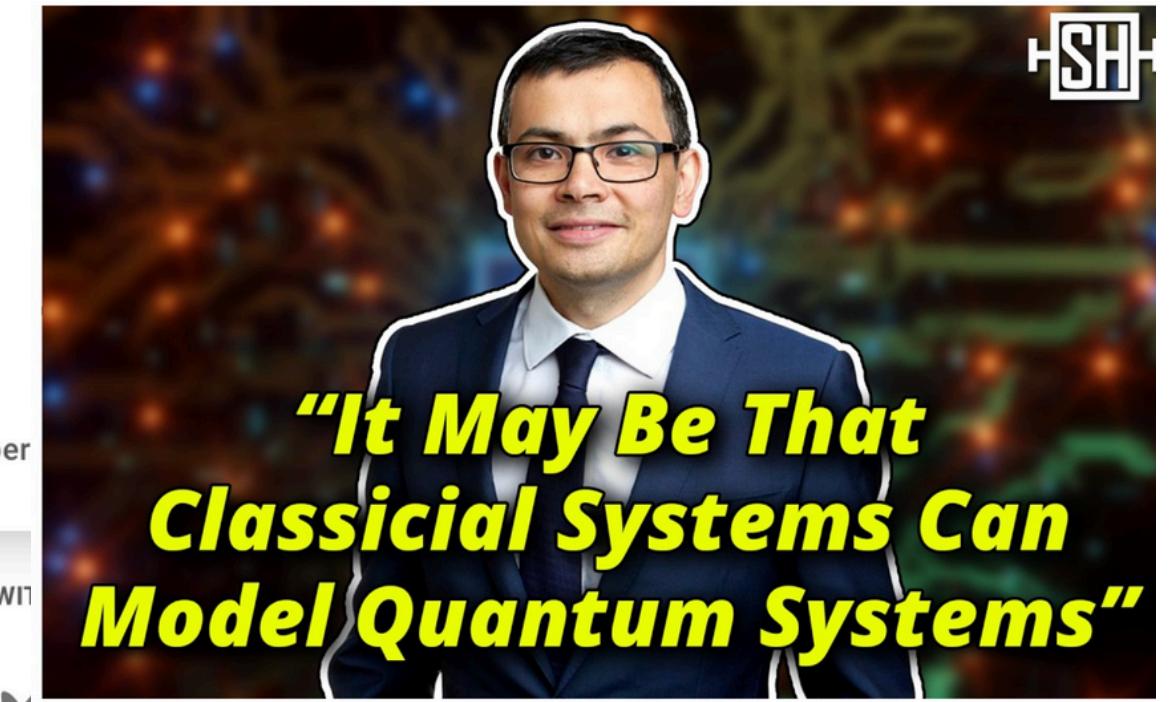
RESEARCH ARTICLE



Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks

GIUSEPPE CARLEO AND MATTHIAS TROYER [Authors Info & Affiliations](#)

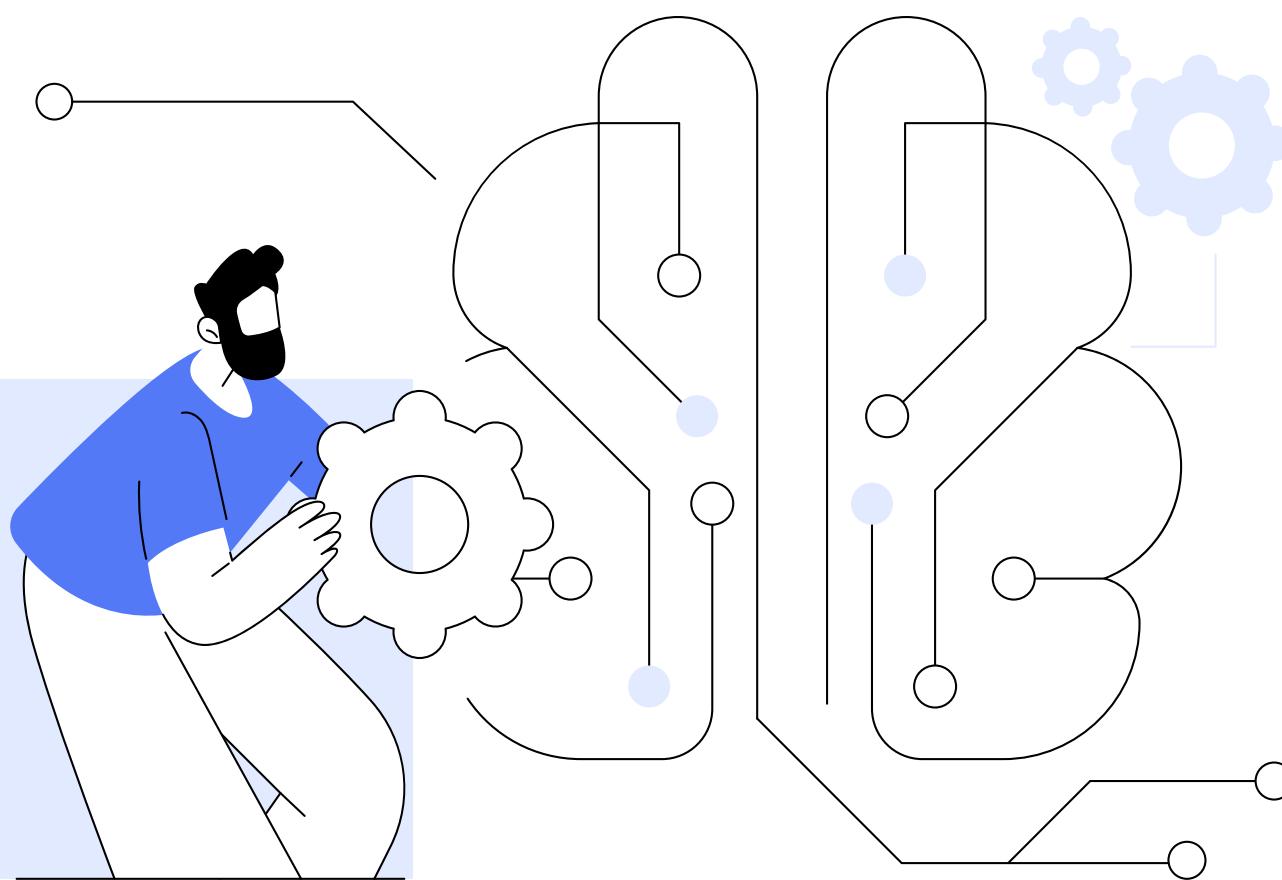
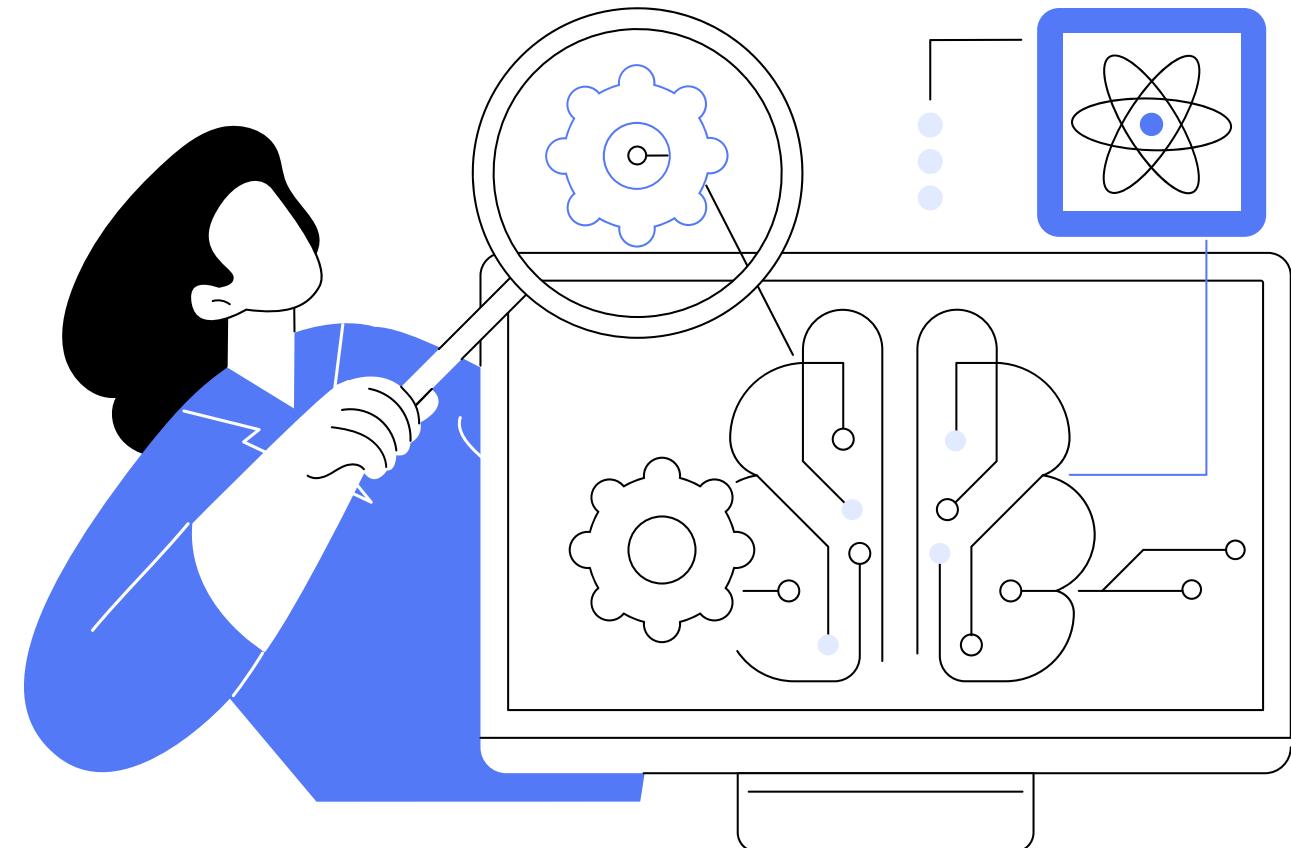
SCIENCE • 10 Feb 2017 • Vol 355, Issue 6325 • pp. 602-606 • DOI: 10.1126/science.aag2302



NEURAL NETWORK QUANTUM STATE

Ground state energy:

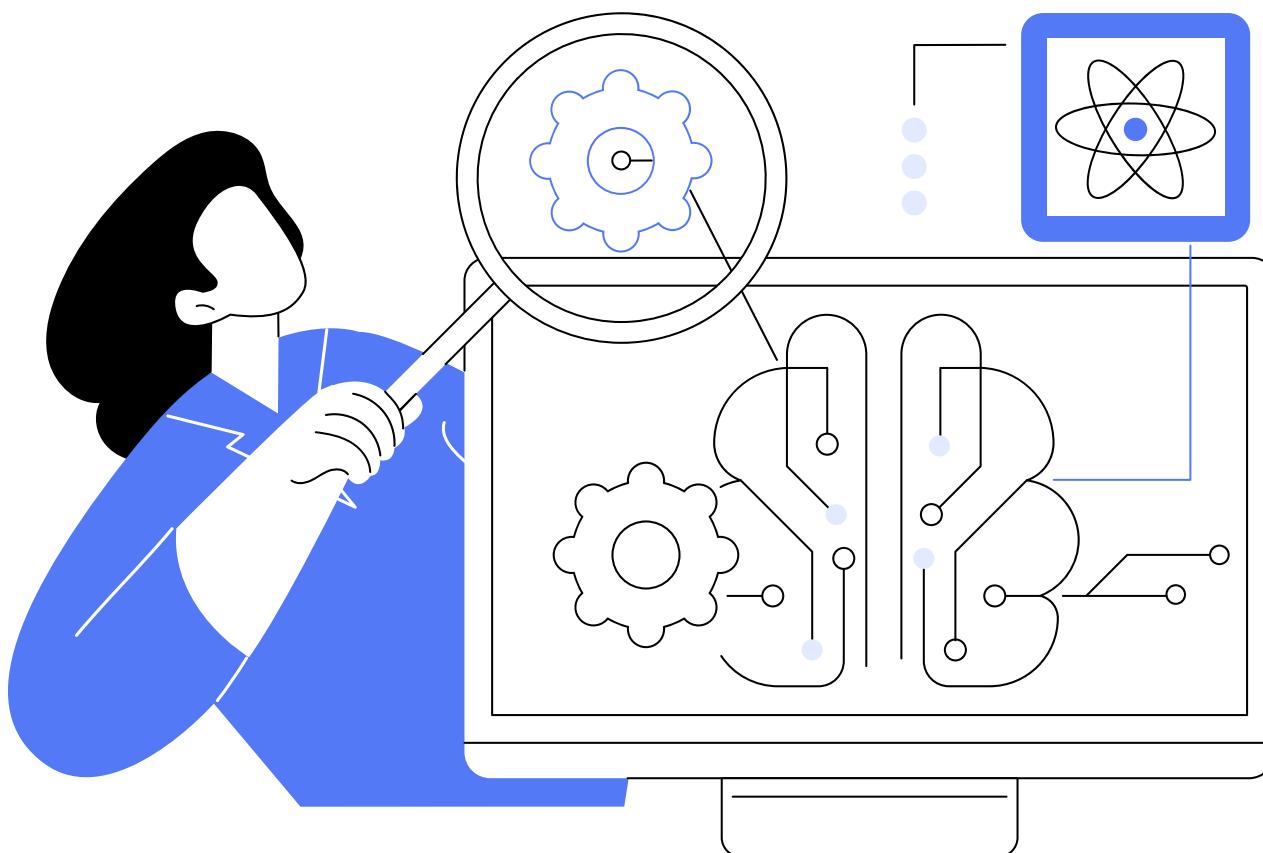
$$\min_{|\psi\rangle: \||\psi\rangle\|=1} \langle\psi|H|\psi\rangle \leftarrow 2^n$$



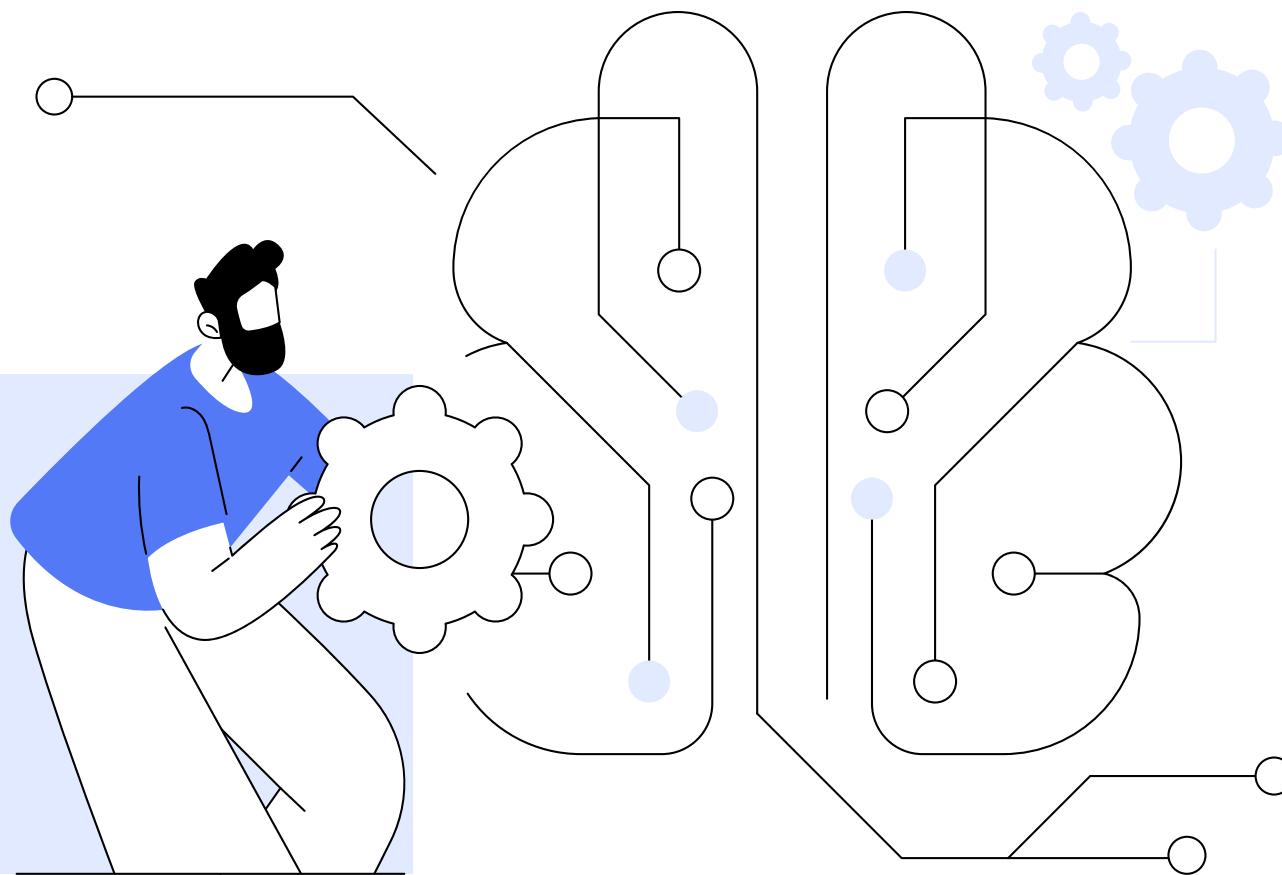
$$|\psi(\theta)\rangle = \sum_{x=0}^{2^n-1} \text{NN}(\theta, x)|x\rangle$$

$$n^2 \rightarrow \langle H \rangle_{\text{GS}} = \min_{\theta} \frac{\langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle}{\langle\psi(\theta)||\psi(\theta)\rangle}$$

NEURAL NETWORK QUANTUM STATE

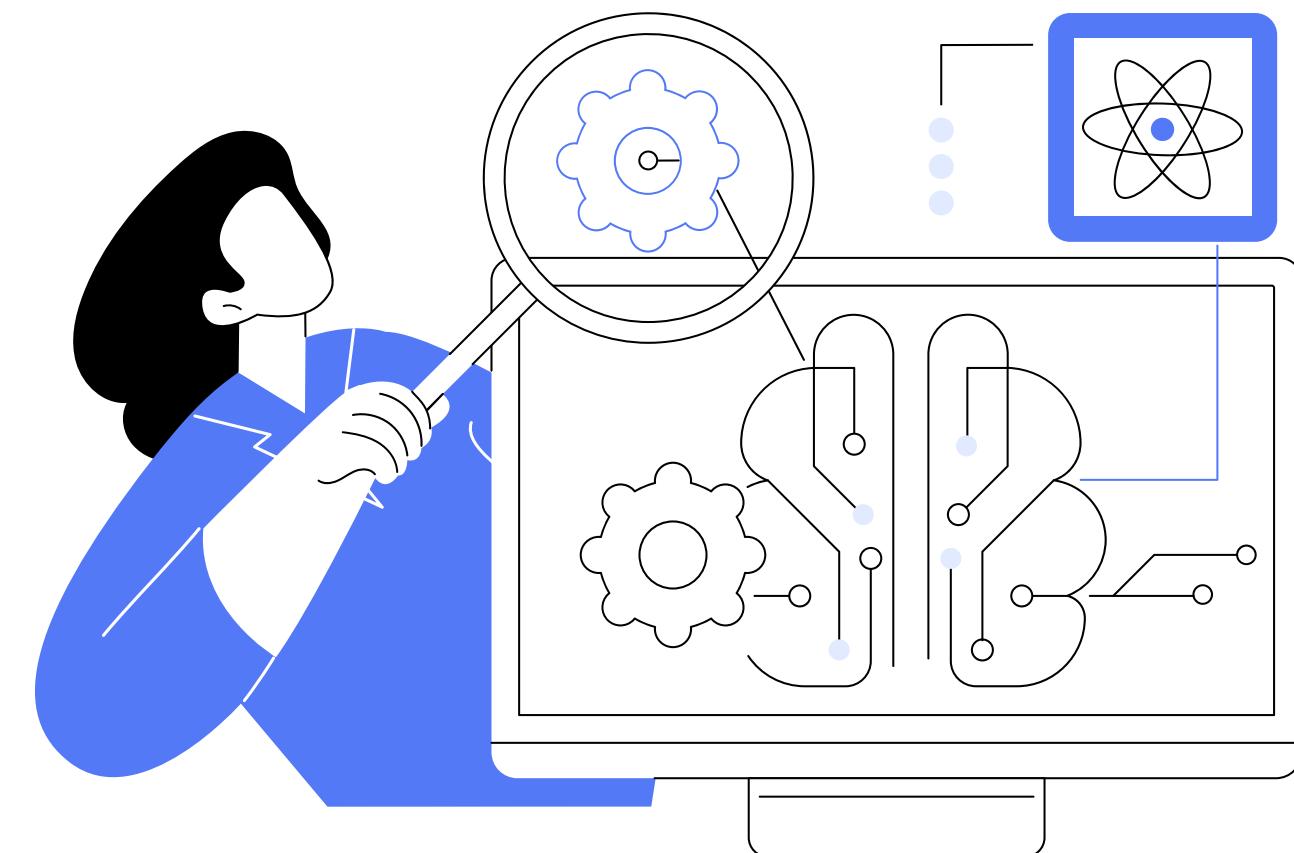


$\langle H \rangle_{GS}$ is expectation value of a function over a probability distribution

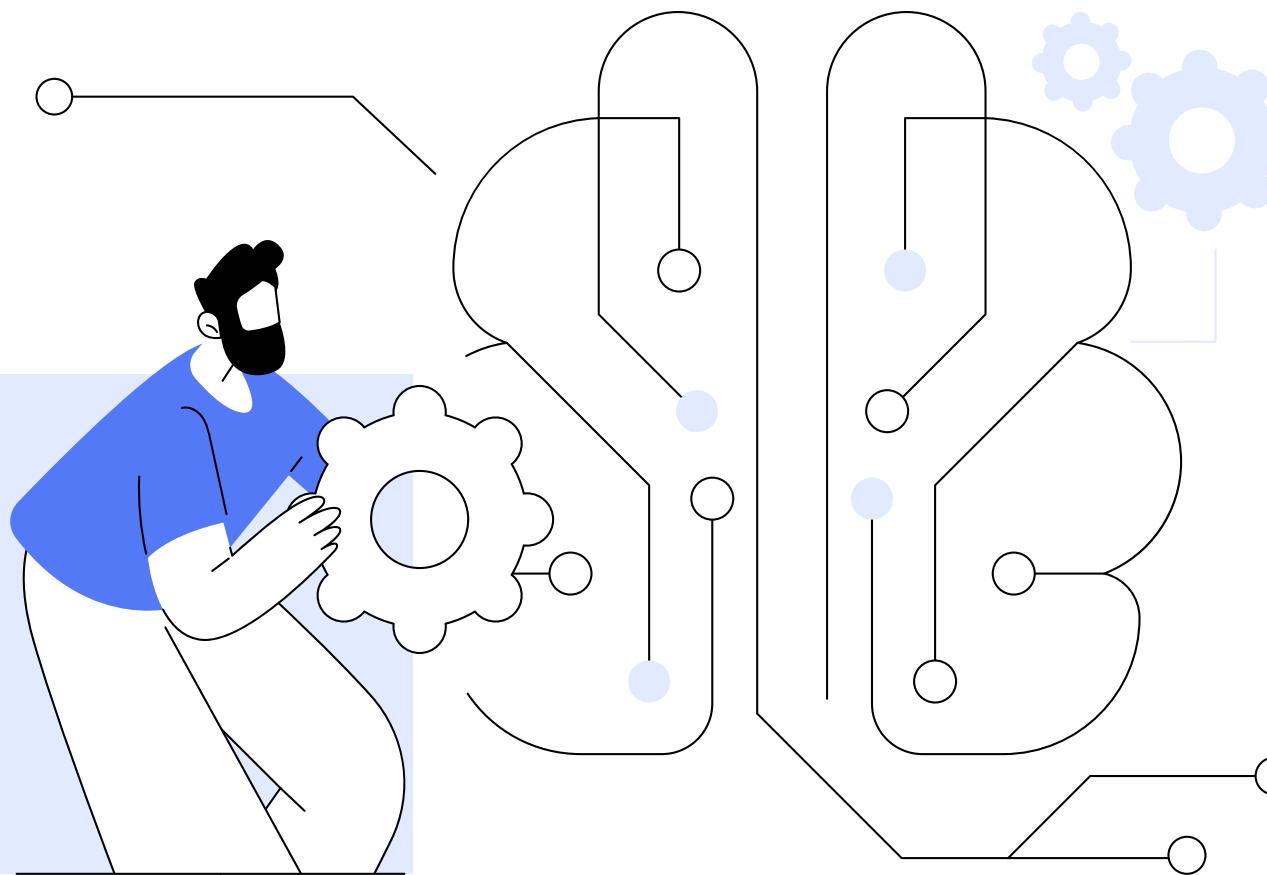


$$\langle H \rangle_{GS} = \min_{\theta} \frac{\langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle}{\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle}$$

NEURAL NETWORK QUANTUM STATE



$\langle H \rangle_{\text{GS}}$ is expectation value of a function over a probability distribution
→ Can minimize loss by random algorithm provided by Netket



$$\langle H \rangle_{\text{GS}} = \min_{\theta} \frac{\langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle}{\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle}$$

1D CHAIN

```
g = nk.graph.Hypercube(length=6, n_dim=1, pbc=False)  
g.draw()
```



$$H_{1D} = \sum_{i=1}^{n-1} \hat{h}_{i,i+1}$$

$$\hat{h}_{i,i+1} = \mathbb{1}_1 \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_{i-1} \otimes h_{i,i+1} \otimes \mathbb{1}_{i+1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_n$$

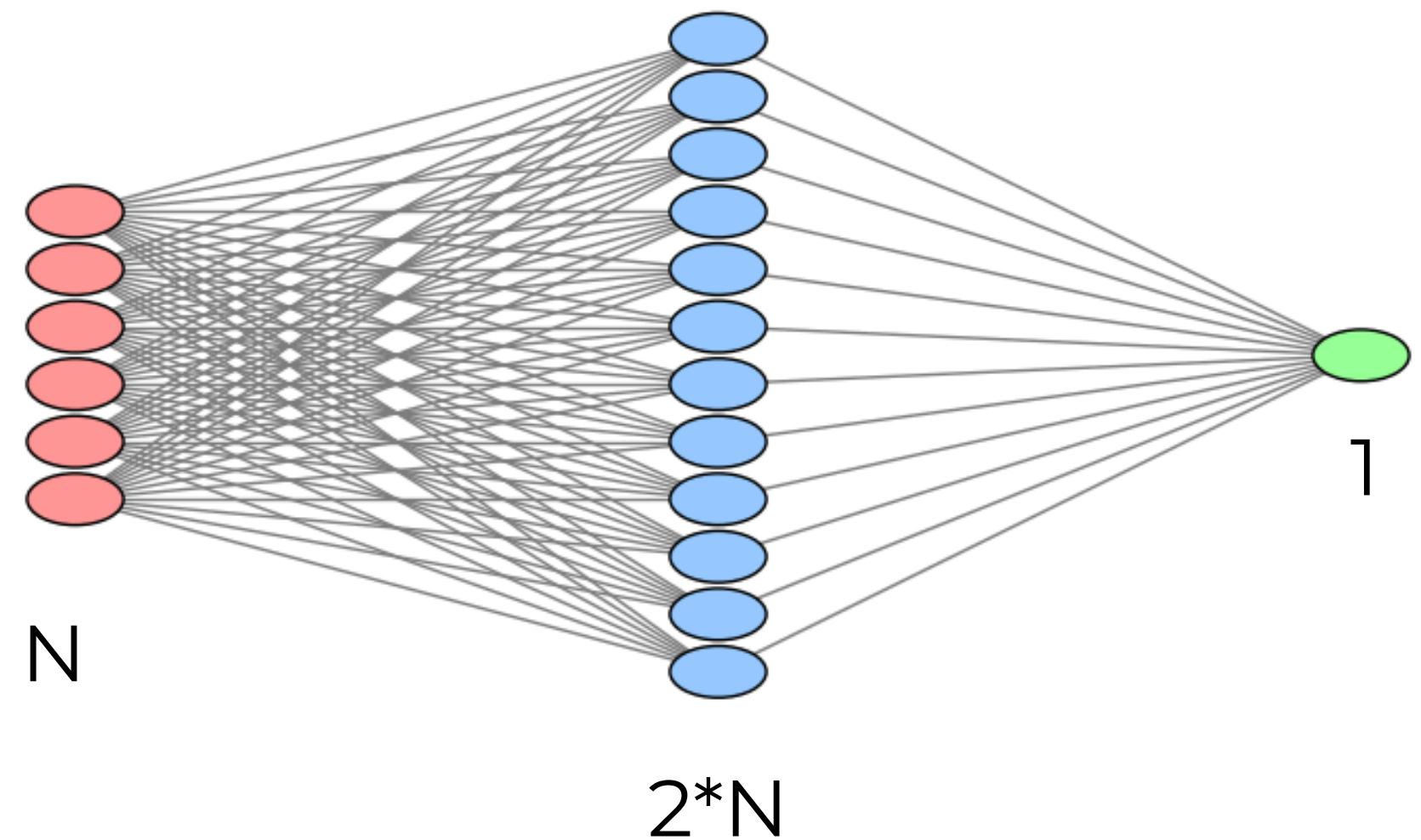
$$h_{i,j} = X_i \otimes X_j + Y_i \otimes Y_j + Z_i \otimes Z_j$$

FEEDFORWARD NEURAL NETWORK (FFNN)

FEED FORWARD NEURAL NETWORK 1

Feed Forward Neural Network 1 with 1 hidden layer

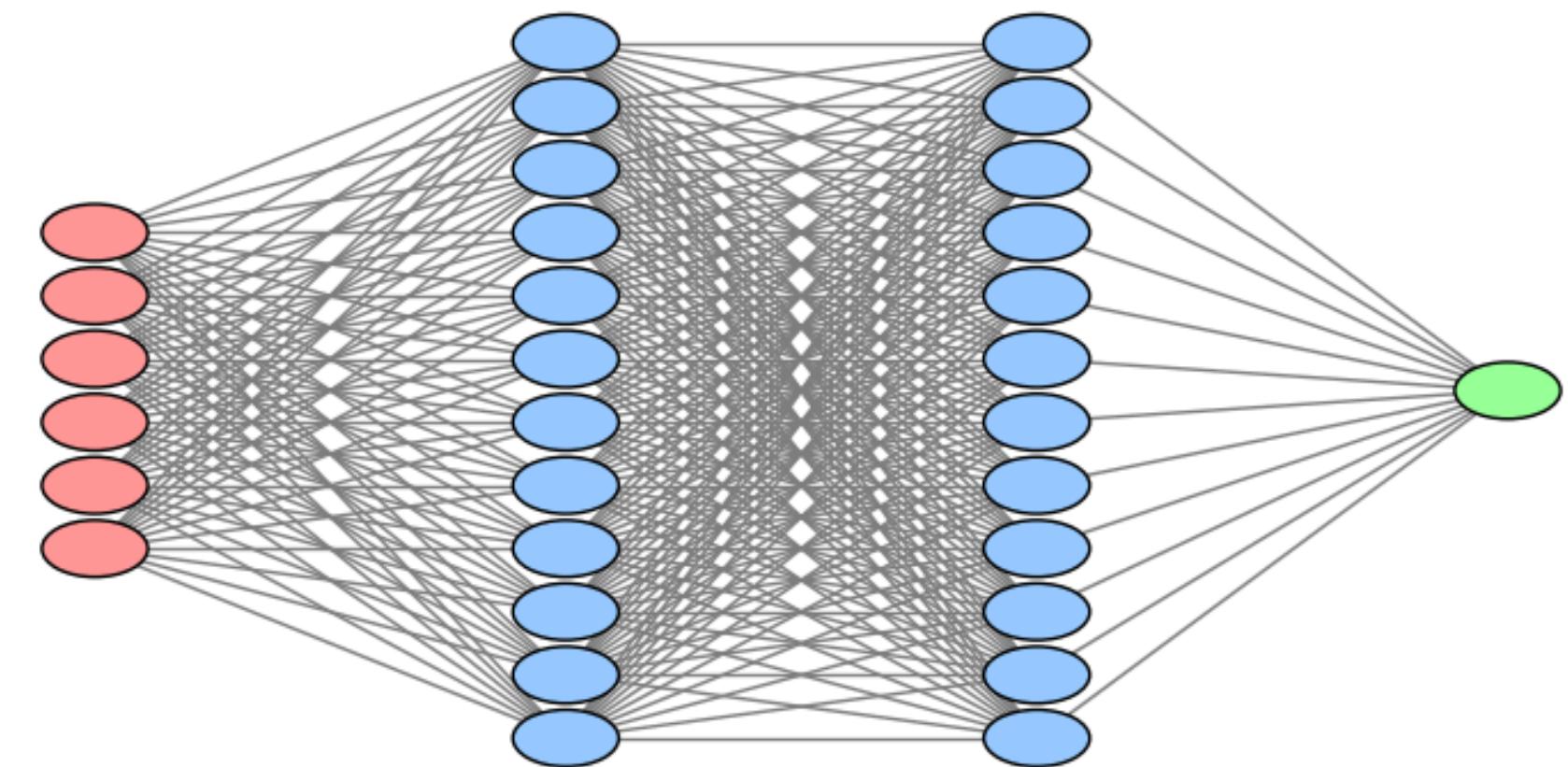
input layer hidden layer
activation function (log cosh)



FEED FORWARD NEURAL NETWORK 2

Feed Forward Neural Network 2 with 2 hidden layers

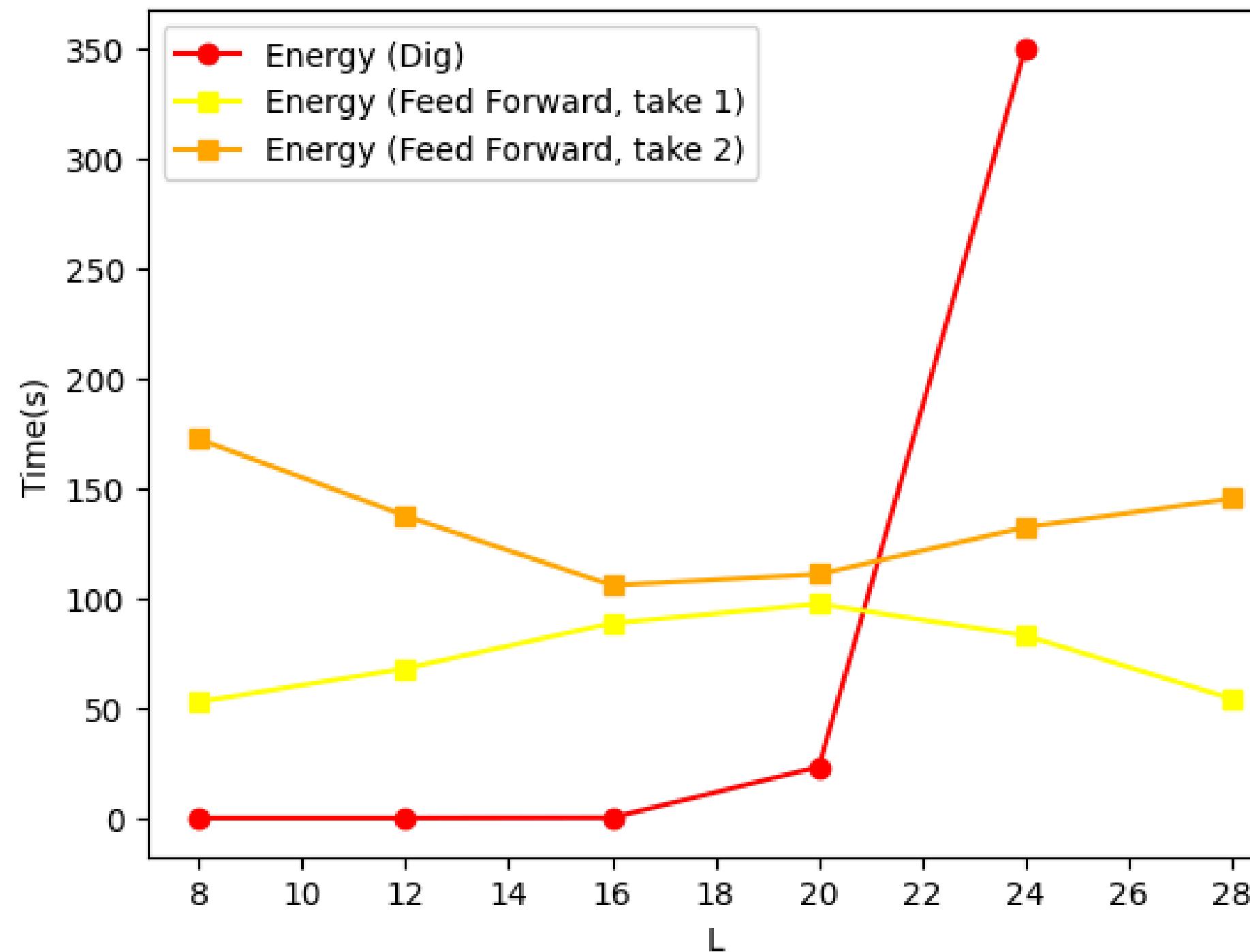
input layer hidden layer 1 hidden layer 2
activation function (log cosh) output layer



Hình minh họa với N=6 ở 2 model

RESULT

Team đã cho chạy thử các hệ 1D có số qubits 8, 12, 16, 20, 24, 28. Và trong tất cả các trường hợp, FFNN đều hoạt động tốt, còn ED thì lại bị crashed tại $L > 24$. Dưới đây là đồ thị so sánh thời gian .

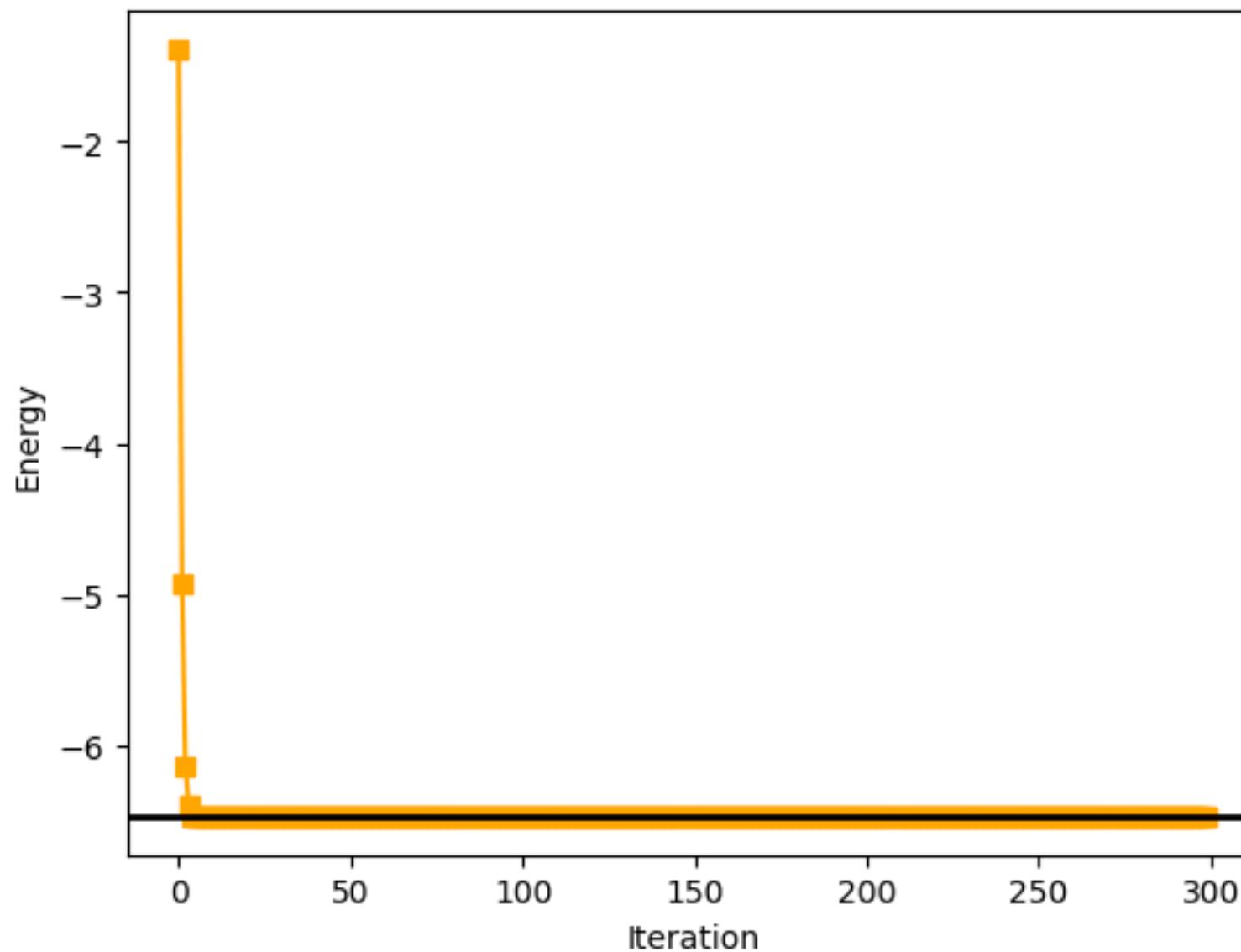


Nhận xét:

- Chéo hóa chính xác (Exact-Diagonalization): hiệu quả ở số lượng qubits nhỏ, nhưng không thể hoạt động với số lượng qubits lớn.
- FFNN 1 và 2 cho thấy sự hiệu quả và ổn định khi tăng số qubits lên, vượt qua E-D.

CALLBACK

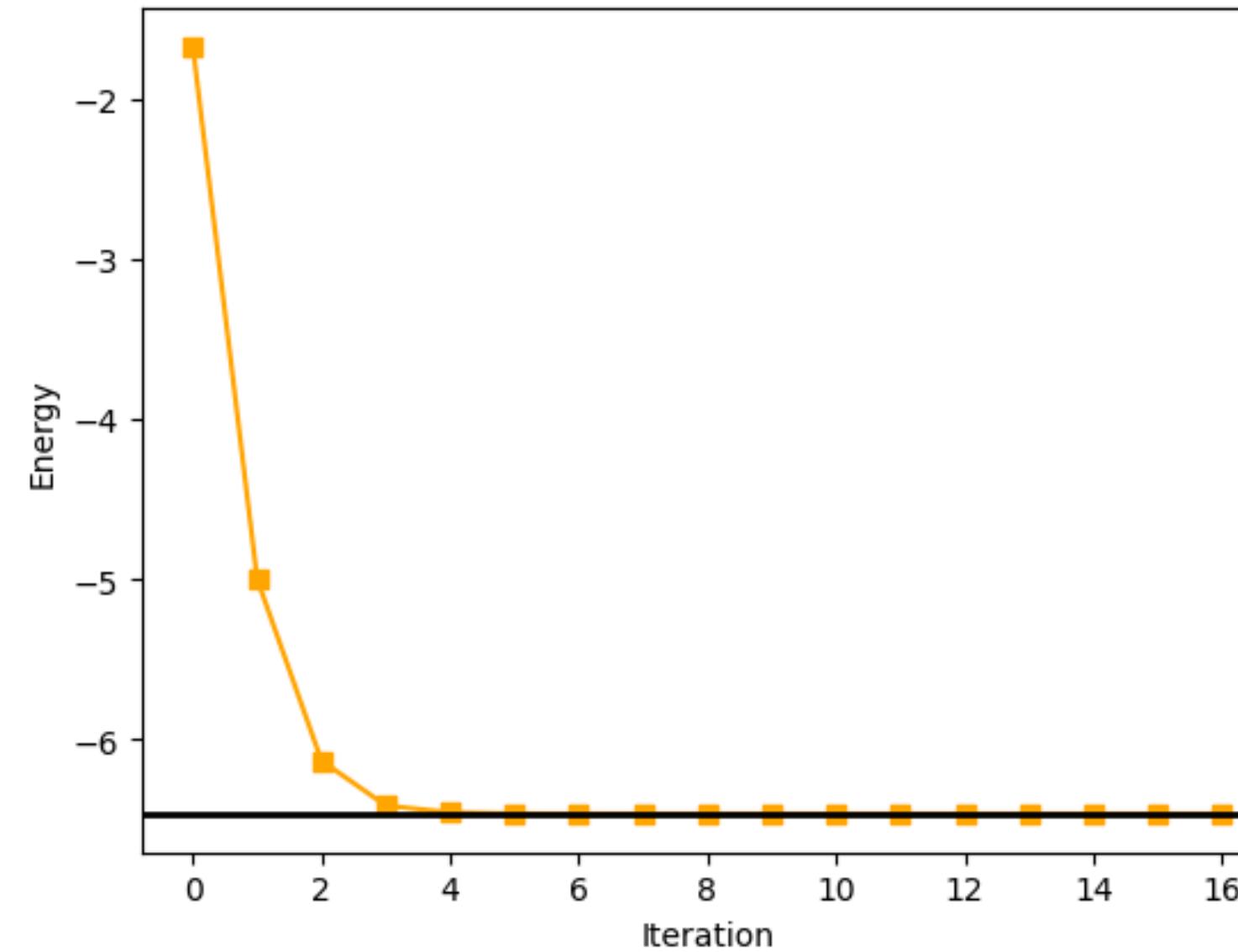
KHÔNG DÙNG LỆNH CALLBACK



100%
Feed Forward calculation
Has 40 parameters
The Feed Forward calculation took 20.73415207862854 seconds

```
from netket.callbacks import EarlyStopping  
  
callback = EarlyStopping(min_delta=5e-3,patience=10)
```

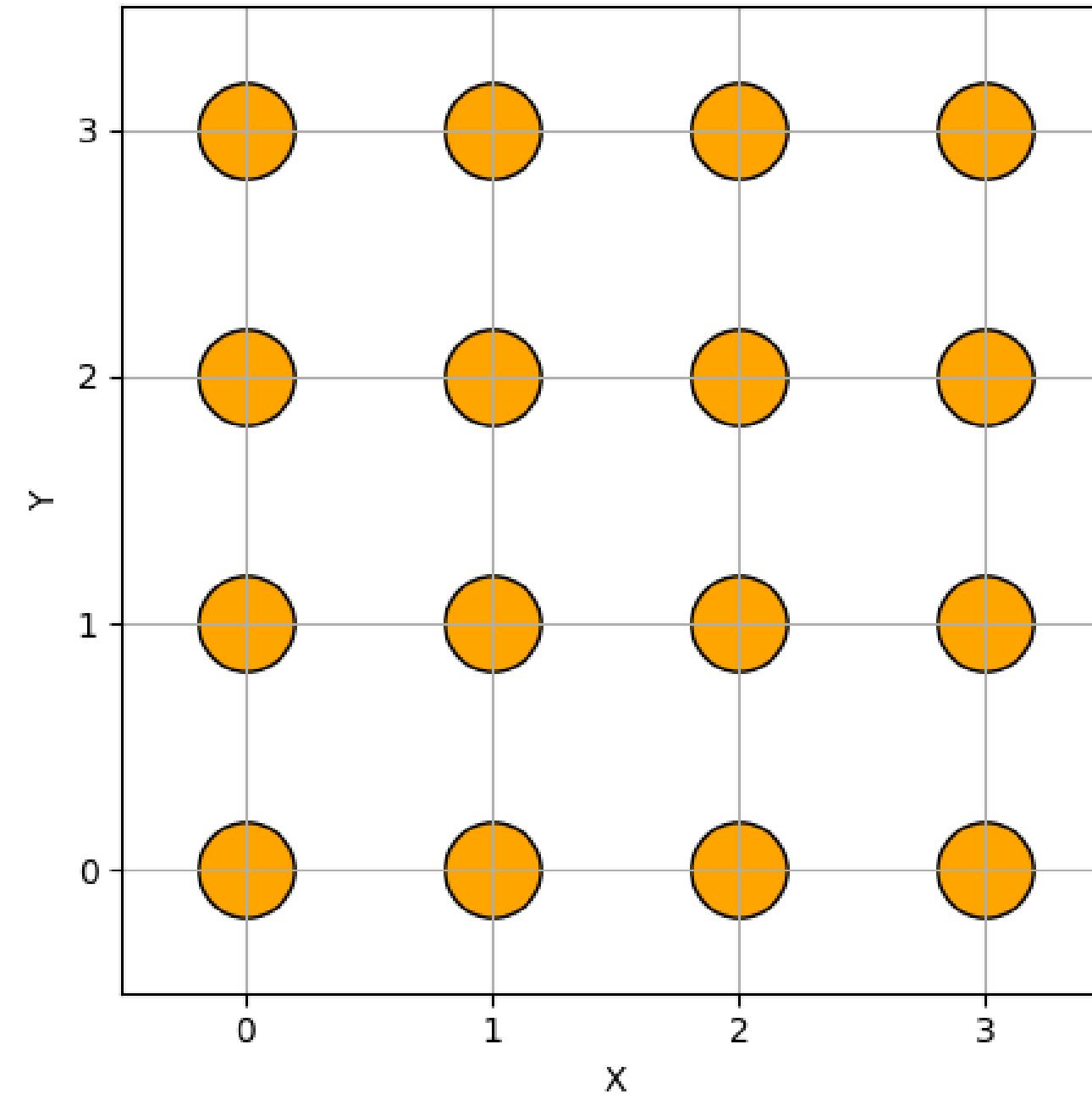
DÙNG LỆNH CALLBACK



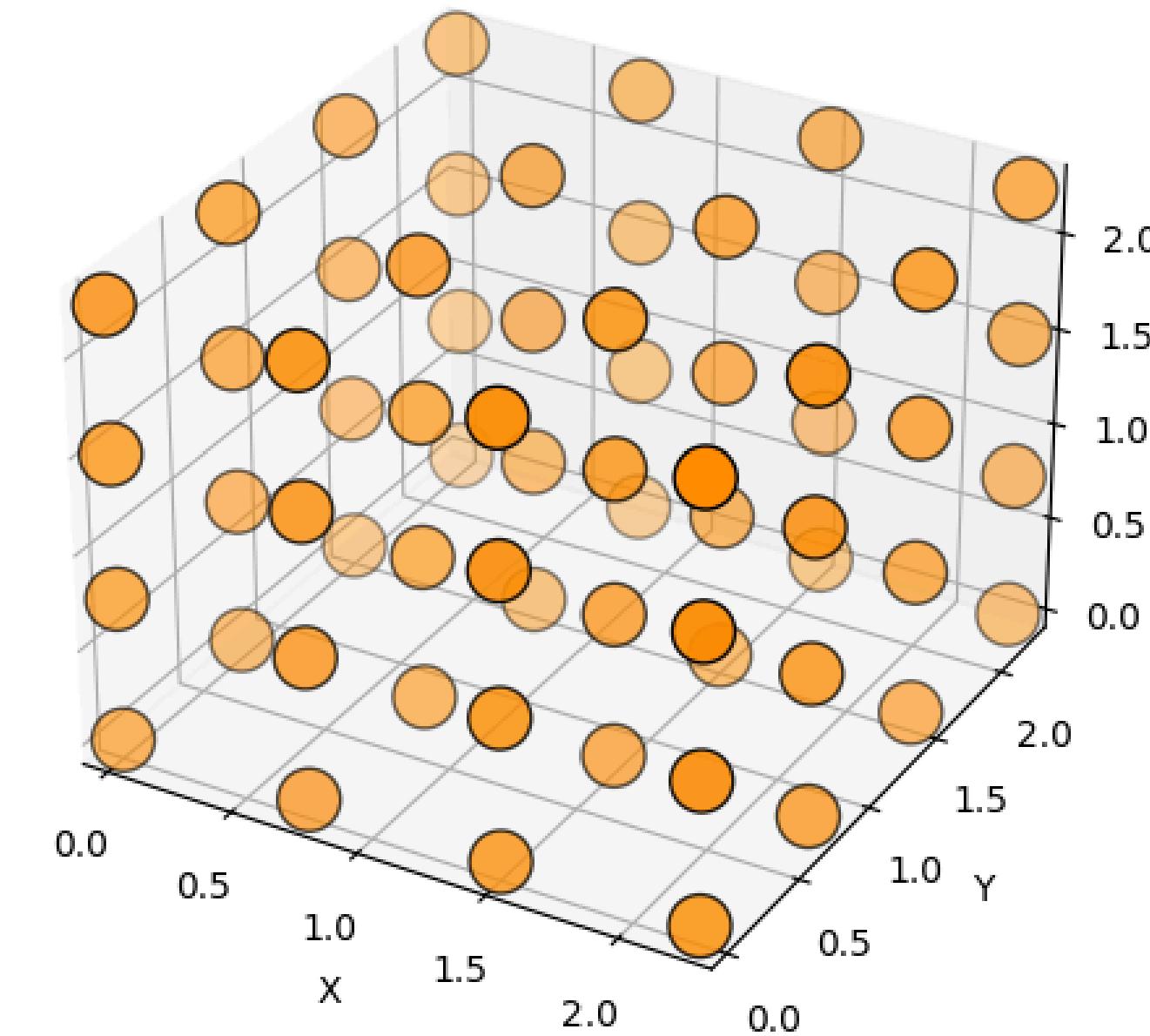
300/300 5%
Feed Forward calculation
Has 40 parameters
The Feed Forward calculation took 11.212866067886353 seconds

HIGHER DIMENSIONS

2D Qubits ($L = 4$)



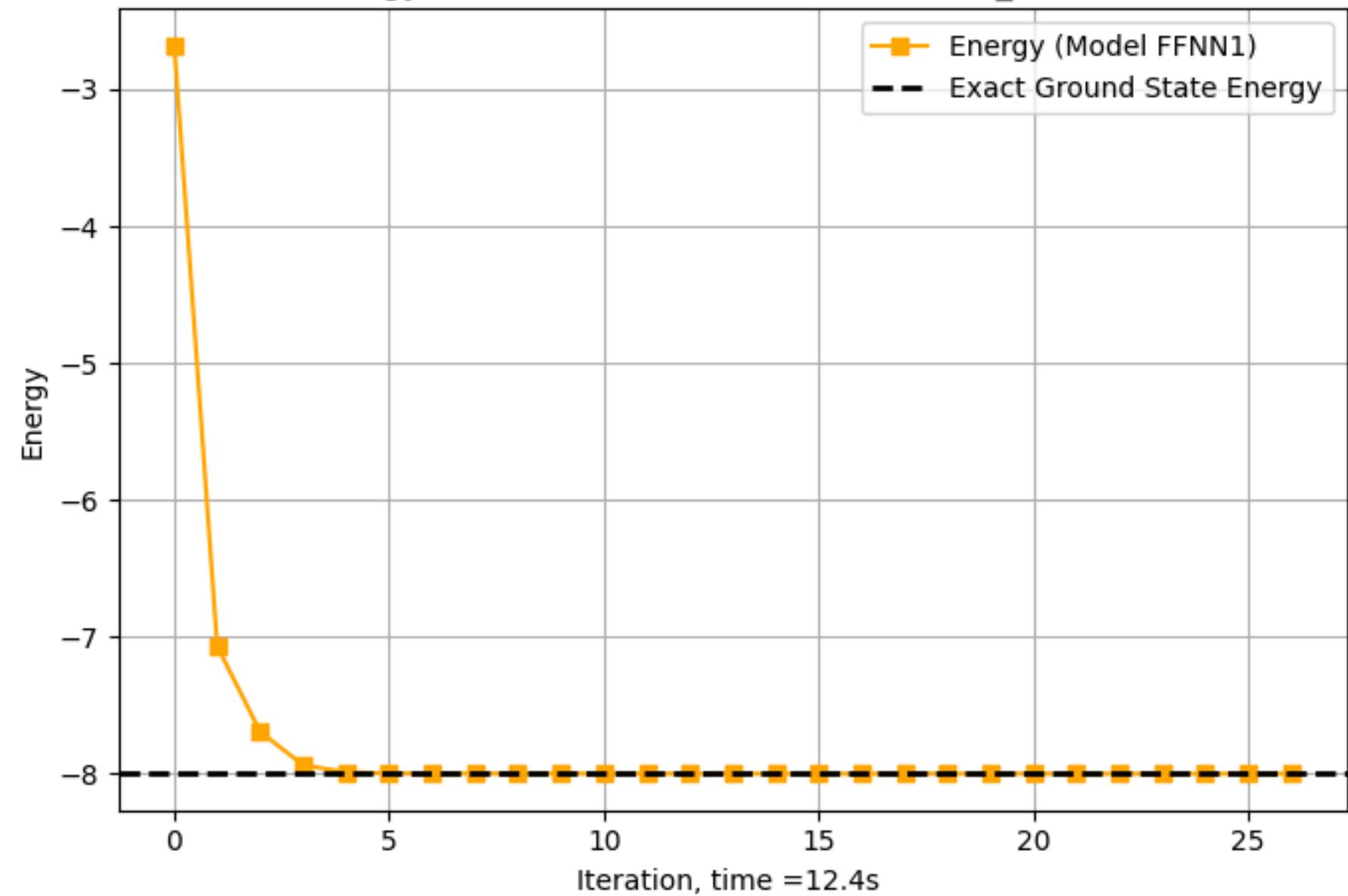
3D Qubits ($L = 4$)



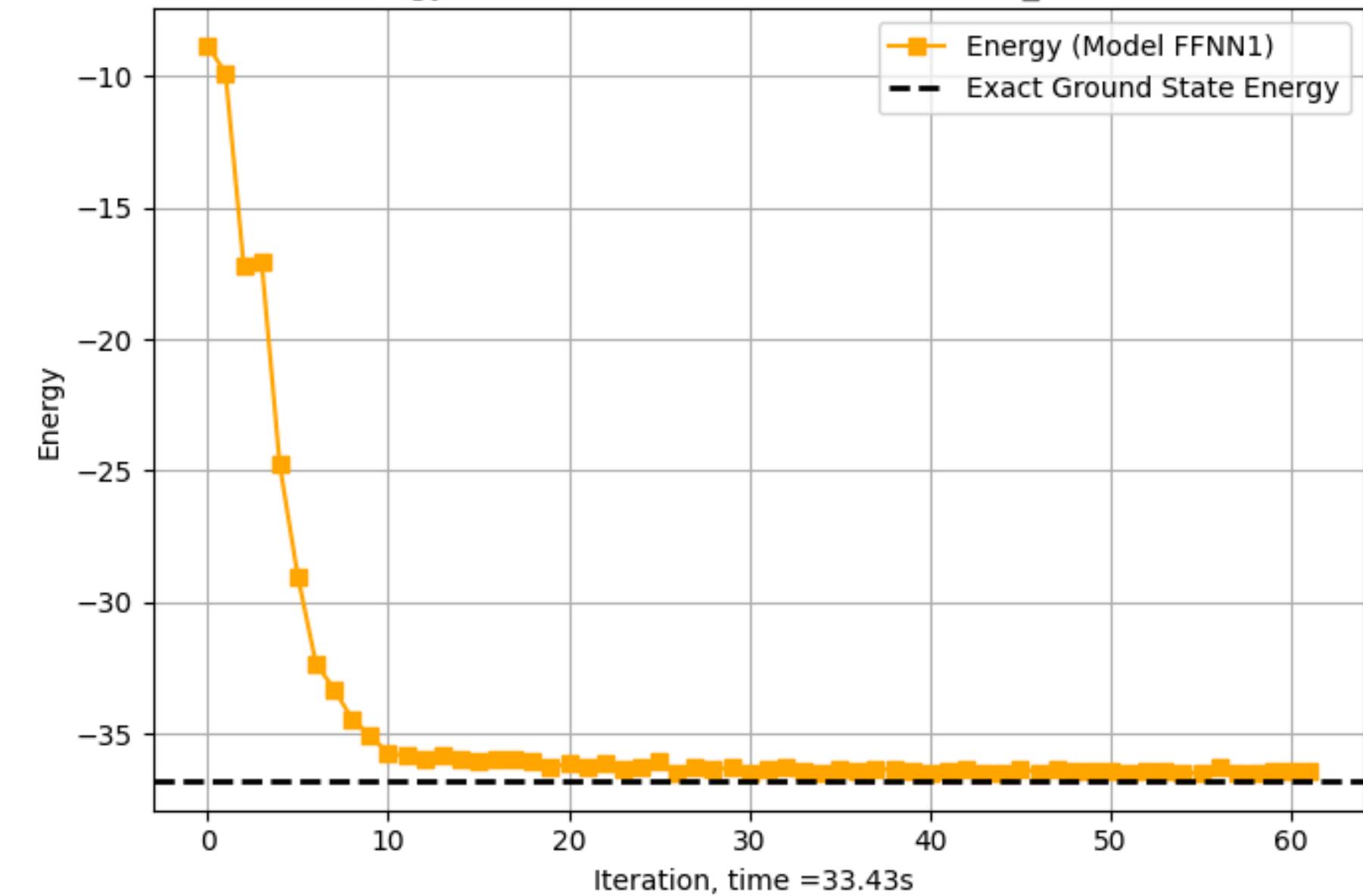
Hình dung về số lượng qubits và cách sắp xếp
của chúng trong không gian

HIGHER DIMENSIONS: 2D

Energy vs Iteration (Model FFNN1, N=2, n_dim = 2)



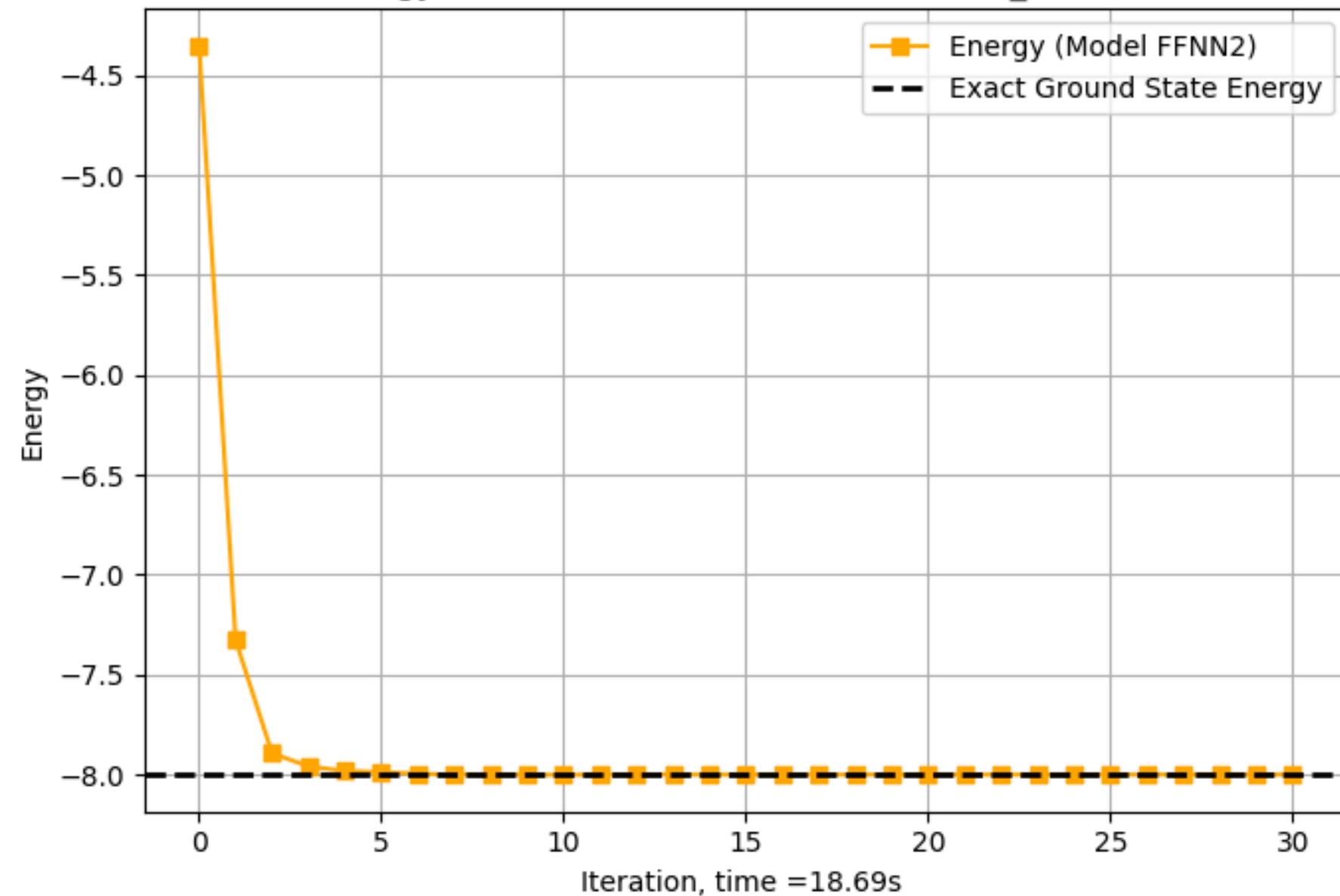
Energy vs Iteration (Model FFNN1, N=4, n_dim = 2)



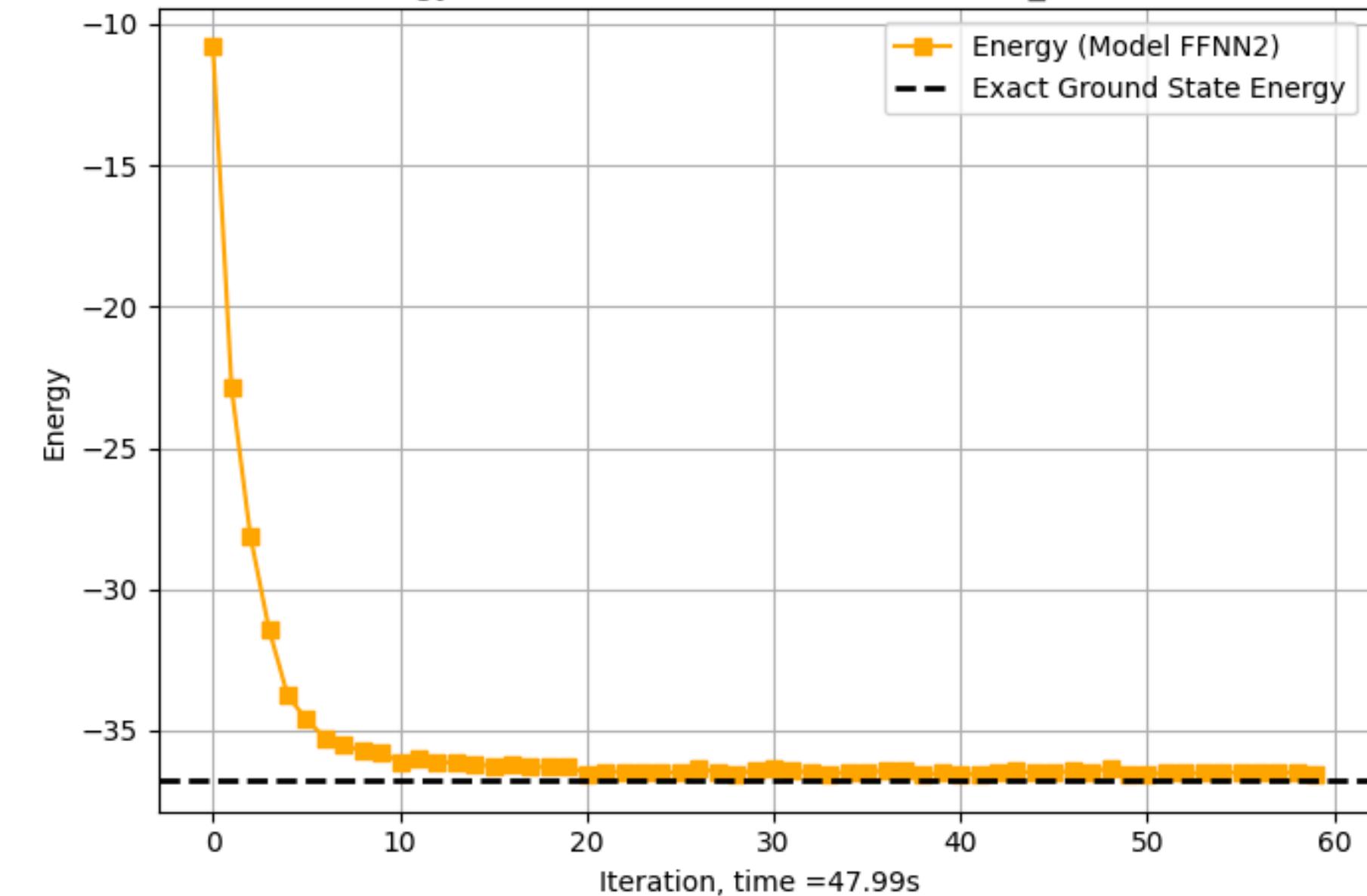
Đồ thị về năng lượng và số lần lặp lại của model FFNN1 với độ dài là 2 và 4 trong không gian 2 chiều

HIGHER DIMENSIONS: 2D

Energy vs Iteration (Model FFNN2, N=2, n_dim = 2)



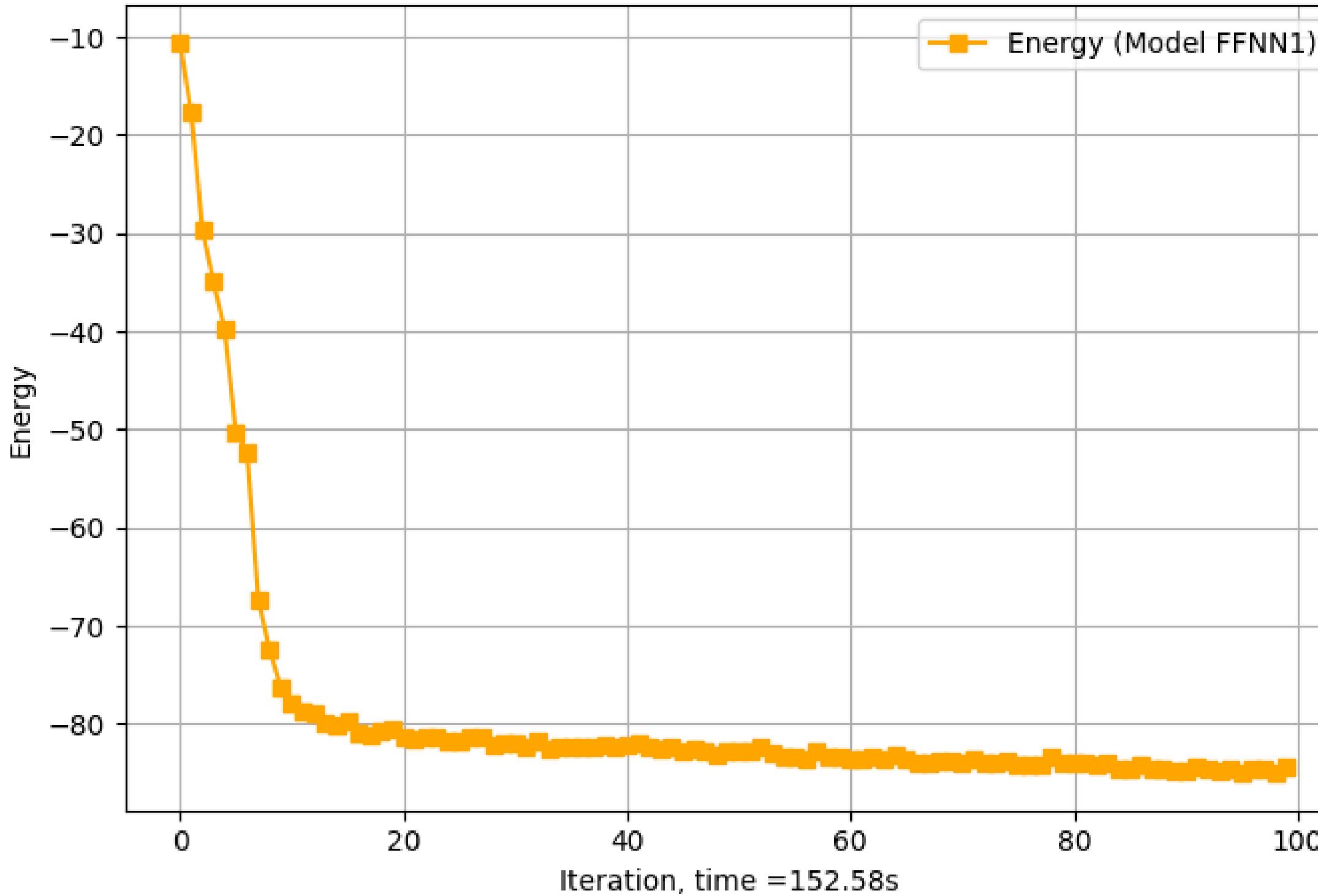
Energy vs Iteration (Model FFNN2, N=4, n_dim = 2)



Đồ thị về năng lượng và số lần lặp lại của model FFNN2 với độ dài là 2 và 4 trong không gian 2 chiều

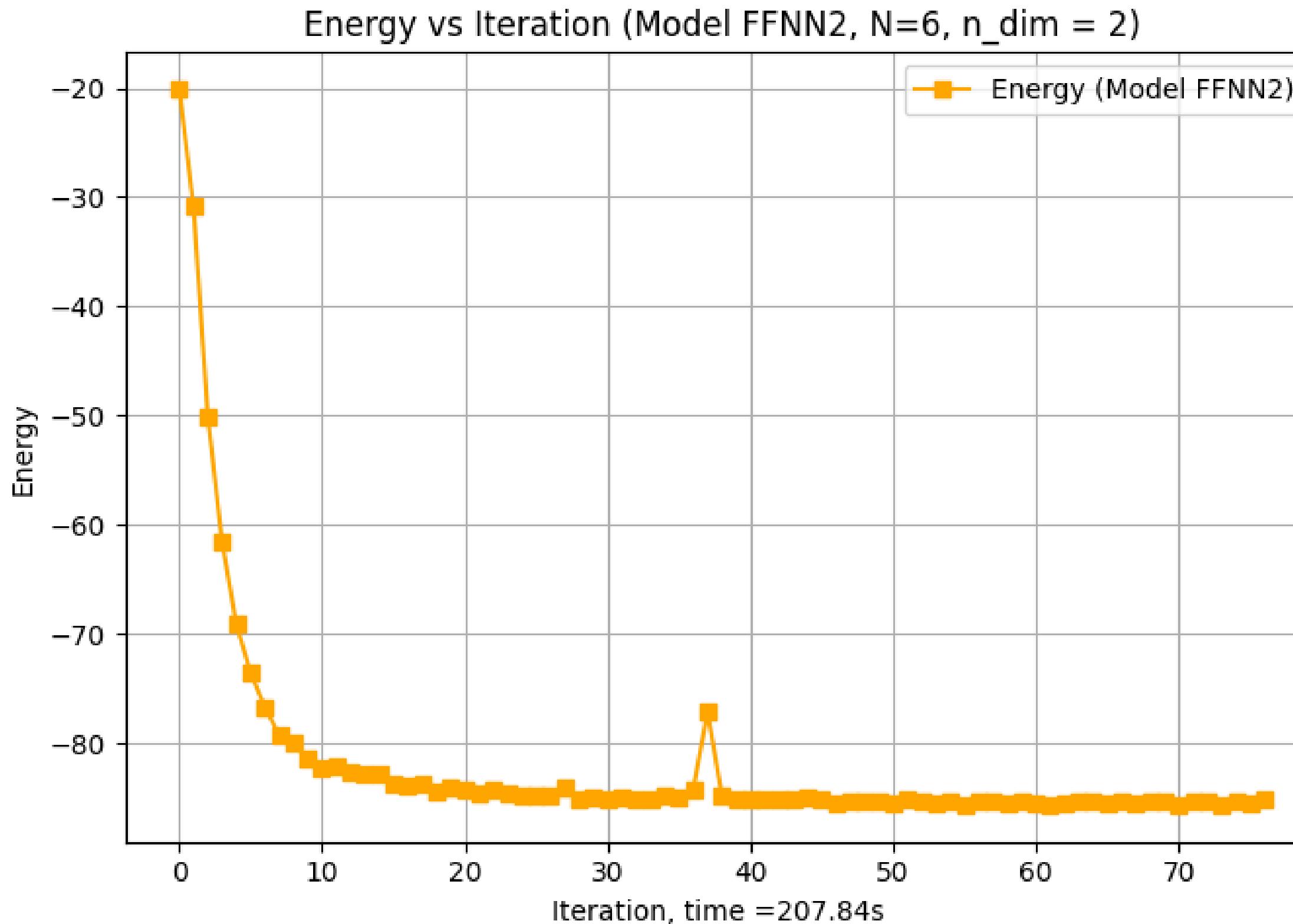
HIGHER DIMENSIONS: 2D

Energy vs Iteration (Model FFNN1, N=6, n_dim = 2)



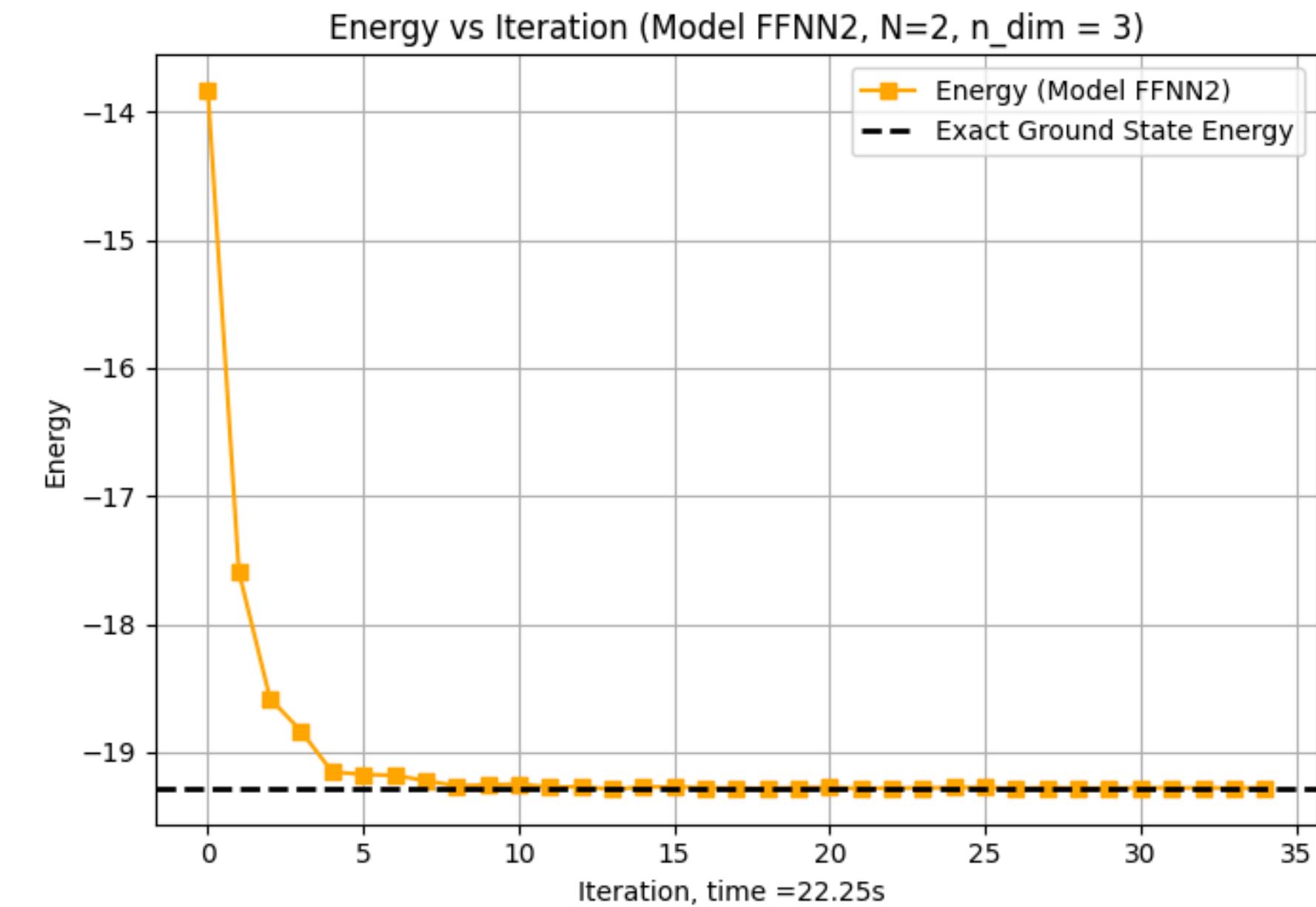
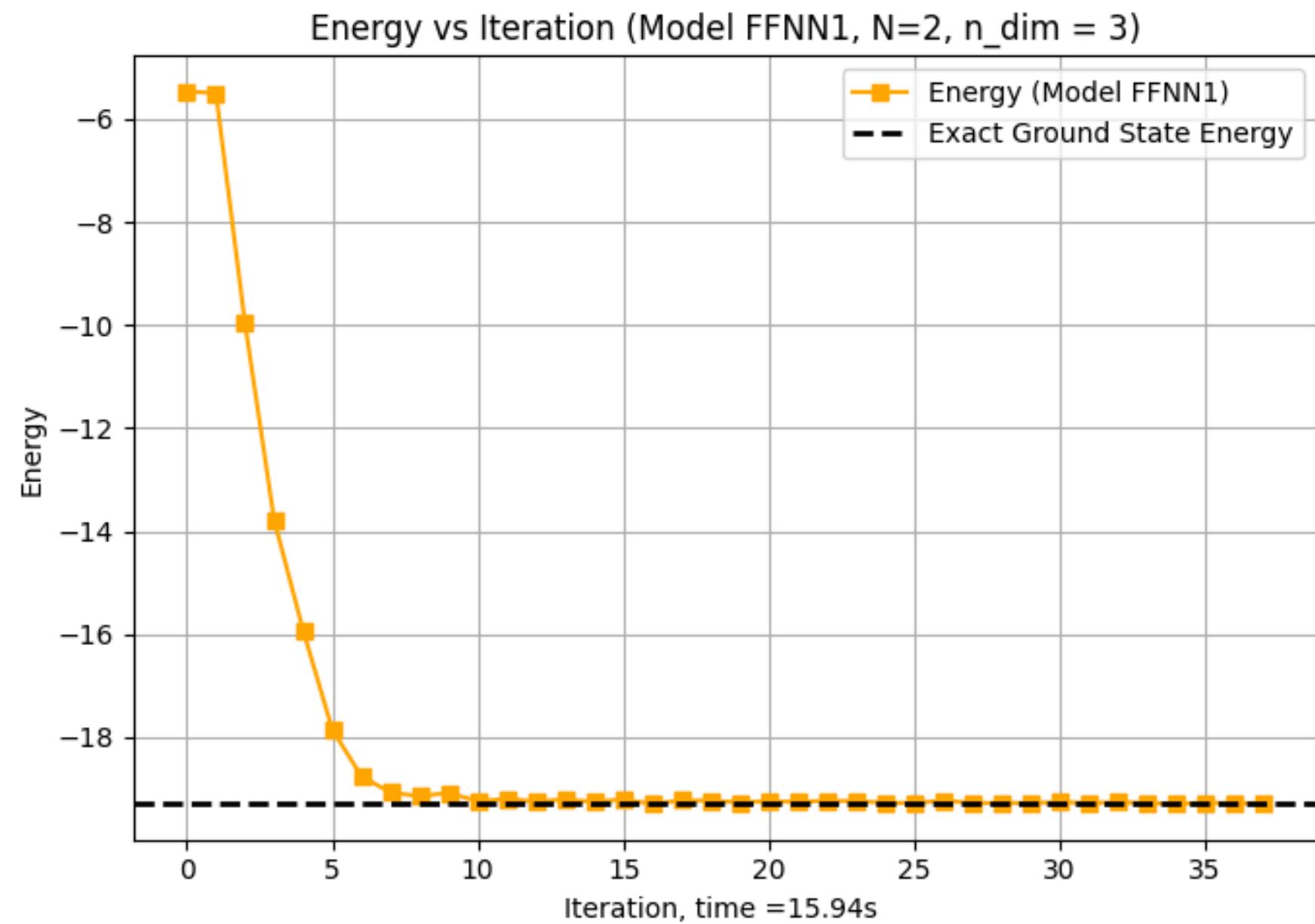
Đồ thị dự đoán năng lượng ở trạng thái cơ bản
của model FFNN1 với N = 6 ở không gian 2 chiều

HIGHER DIMENSIONS: 2D



Đồ thị dự đoán năng lượng ở trạng thái cơ bản
của model FFNN2 với N = 6 ở không gian 2 chiều

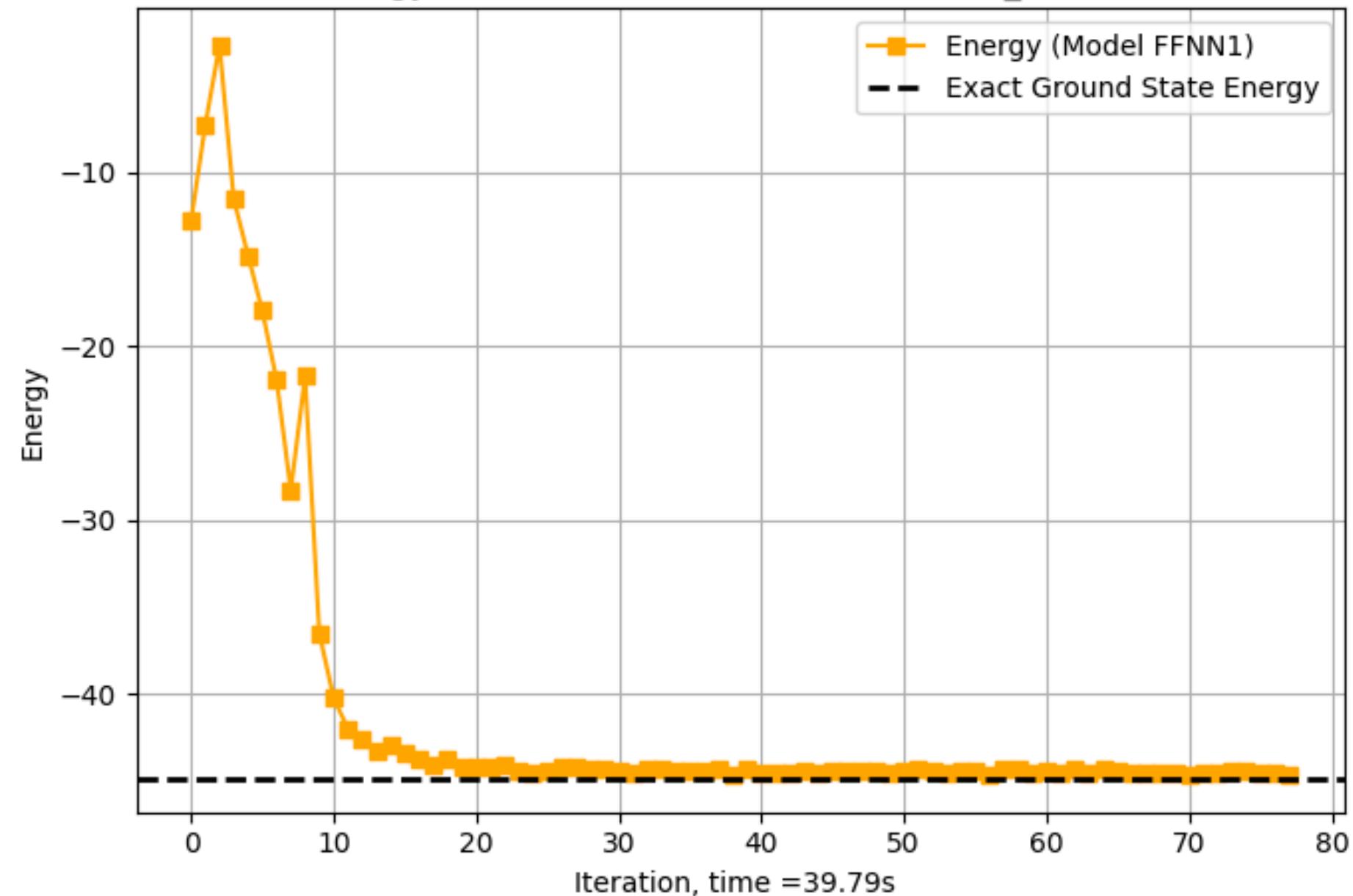
HIGHER DIMENSIONS: 3D



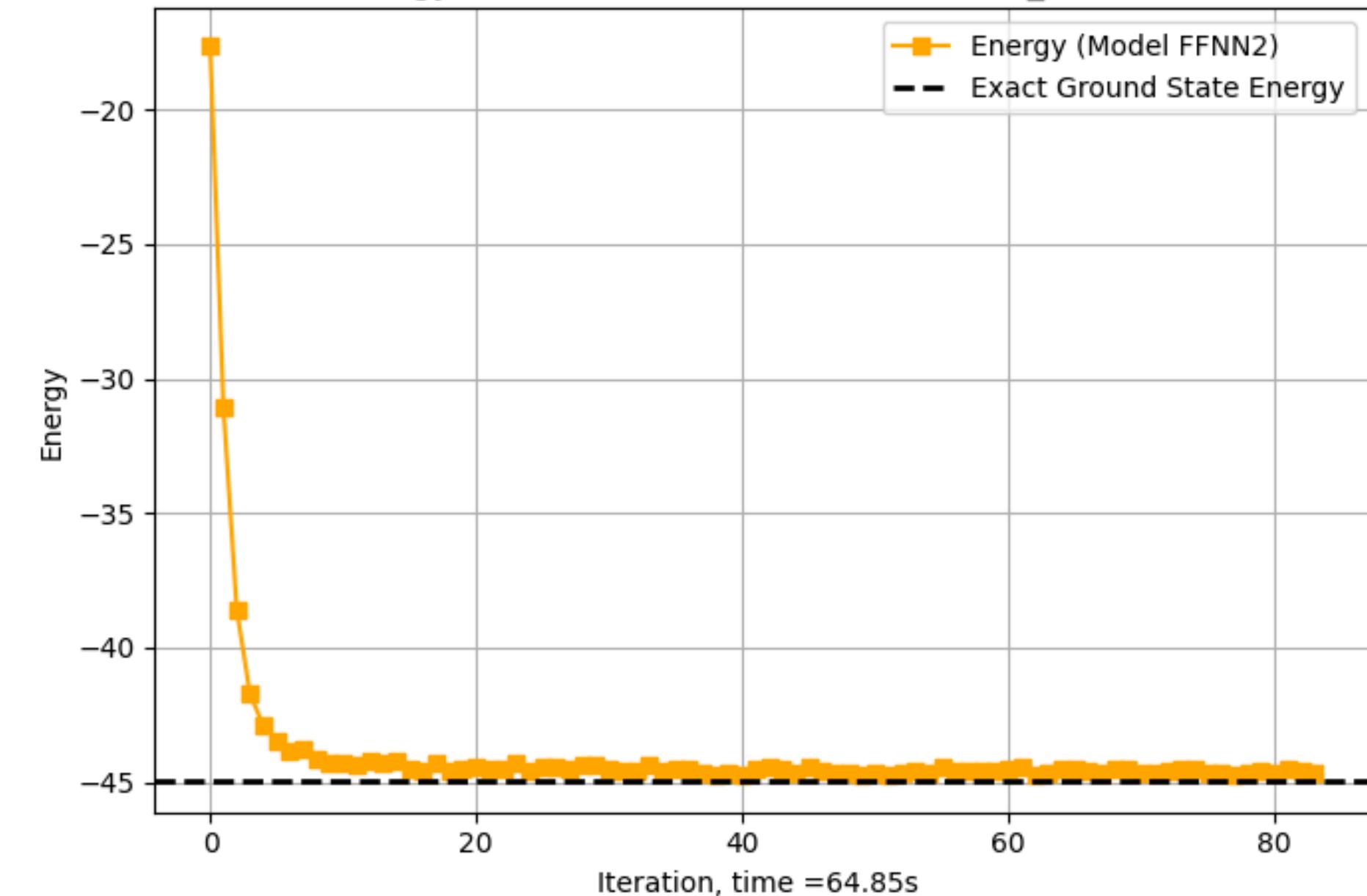
Đồ thị về năng lượng và số lần lặp lại của model FFNN1, FFNN2 với độ dài là 2 trong không gian 3 chiều

HIGHER DIMENSIONS: 4D

Energy vs Iteration (Model FFNN1, N=2, n_dim = 4)



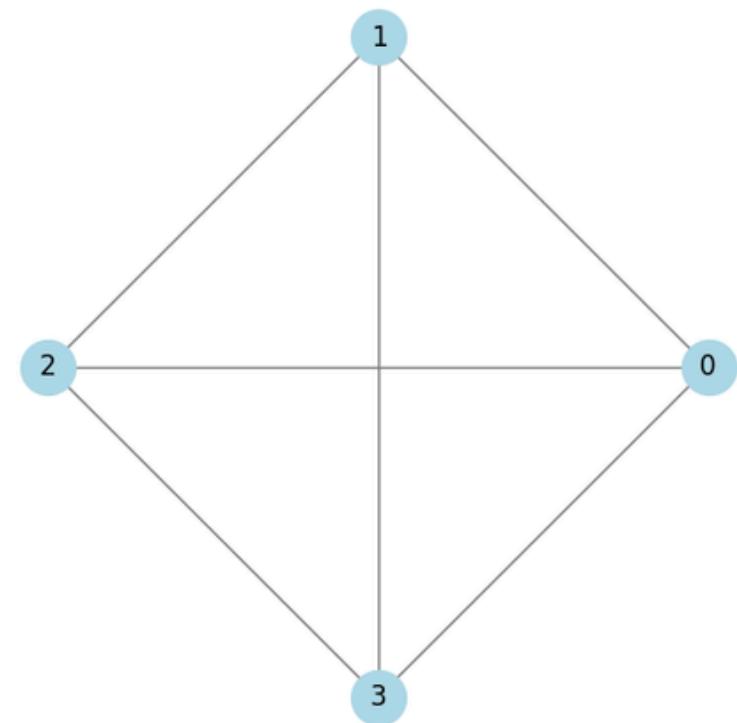
Energy vs Iteration (Model FFNN2, N=2, n_dim = 4)



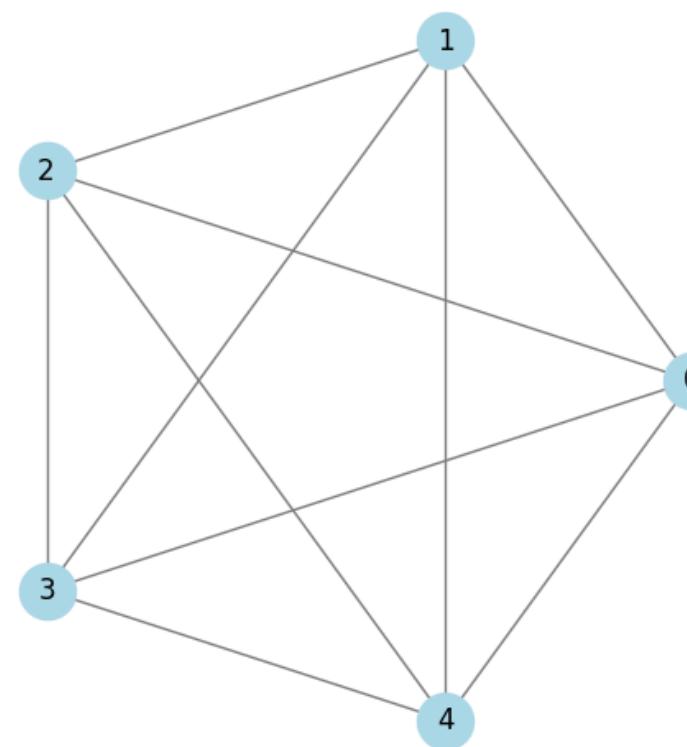
Đồ thị về năng lượng và số lần lặp lại của model FFNN1,
FFNN2 với độ dài là 2 trong không gian 4 chiều

COMPLETE GRAPH

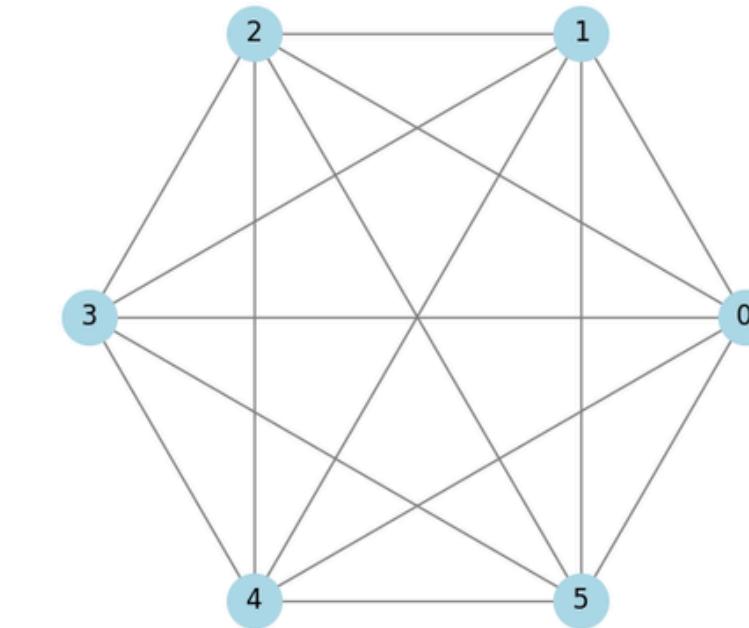
Complete Graph with 4 nodes



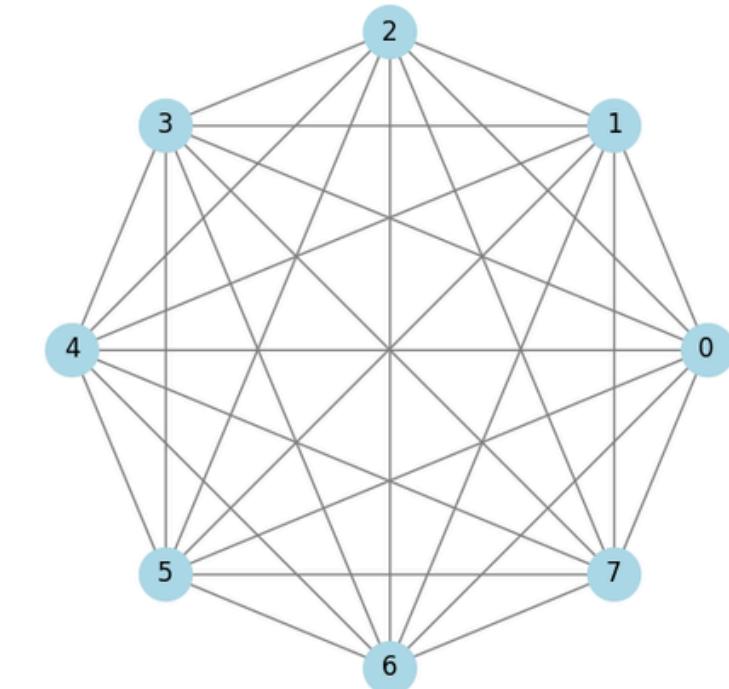
Complete Graph with 5 nodes



Complete Graph with 6 nodes



Complete Graph with 8 nodes

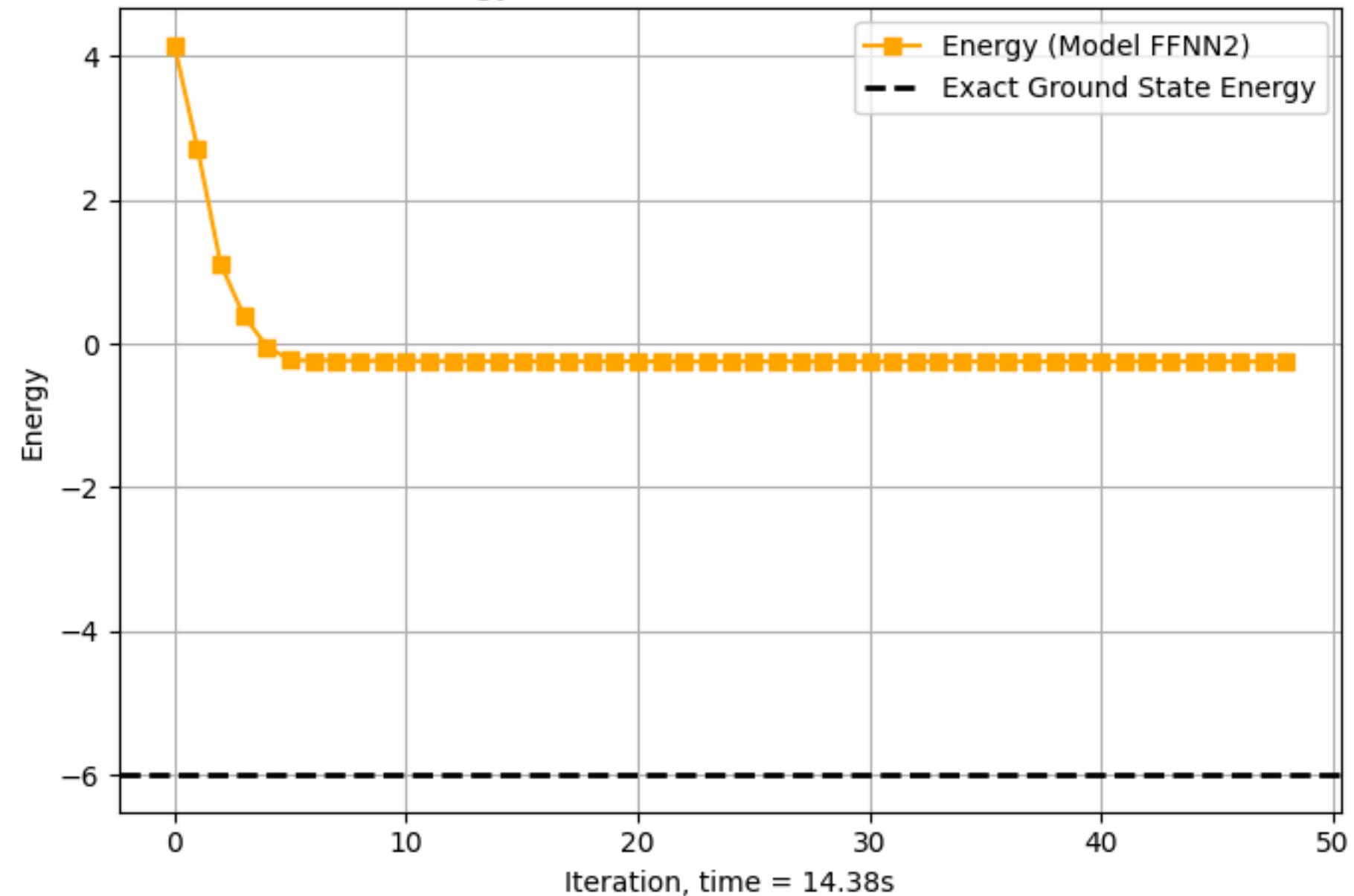


Ground State Energy = $-3N/2$

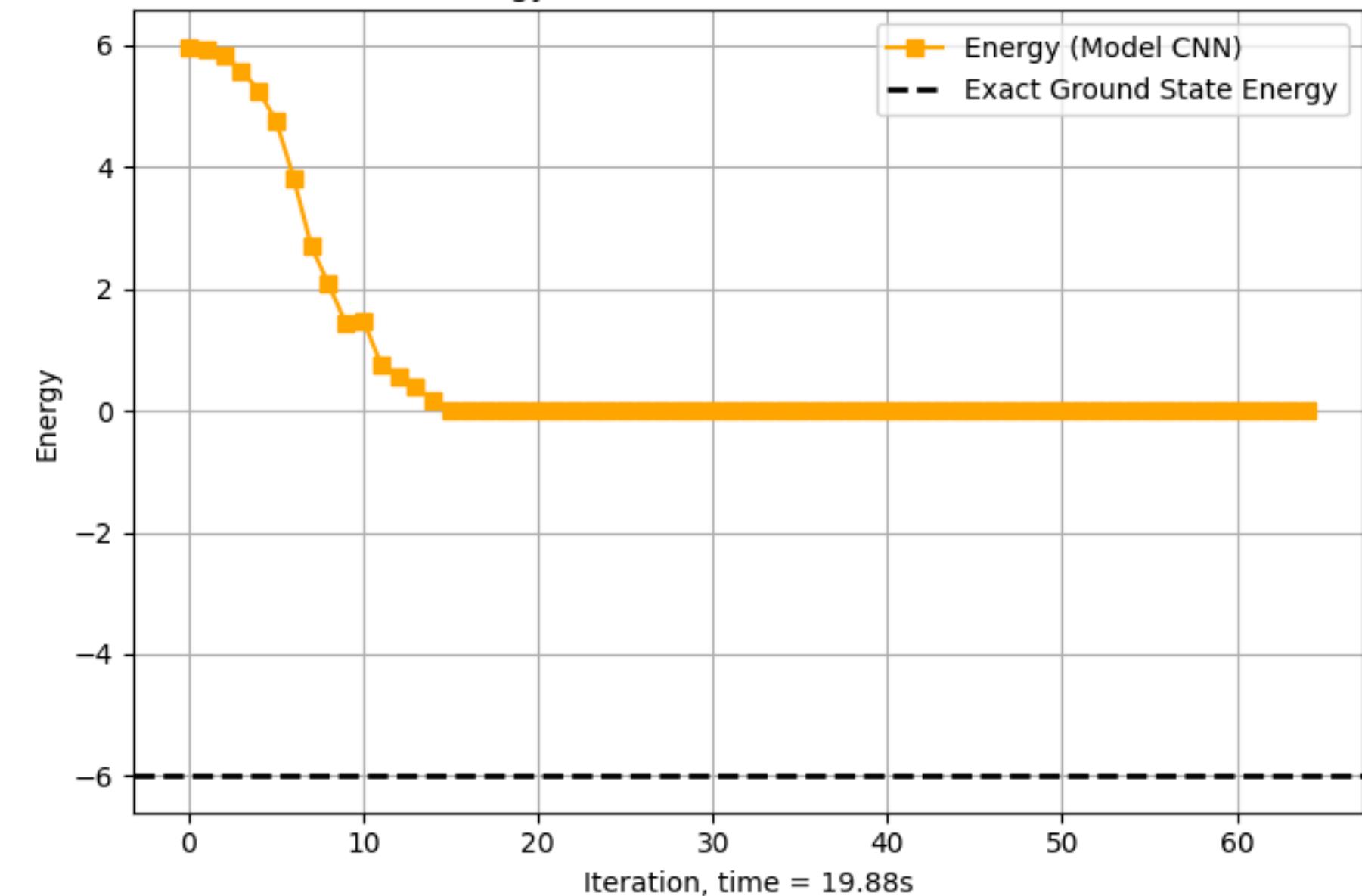
Đồ thị có các đỉnh đều tạo cạnh với các đỉnh còn lại

COMPLETE GRAPH

Energy vs Iteration (Model FFNN2, N=4)

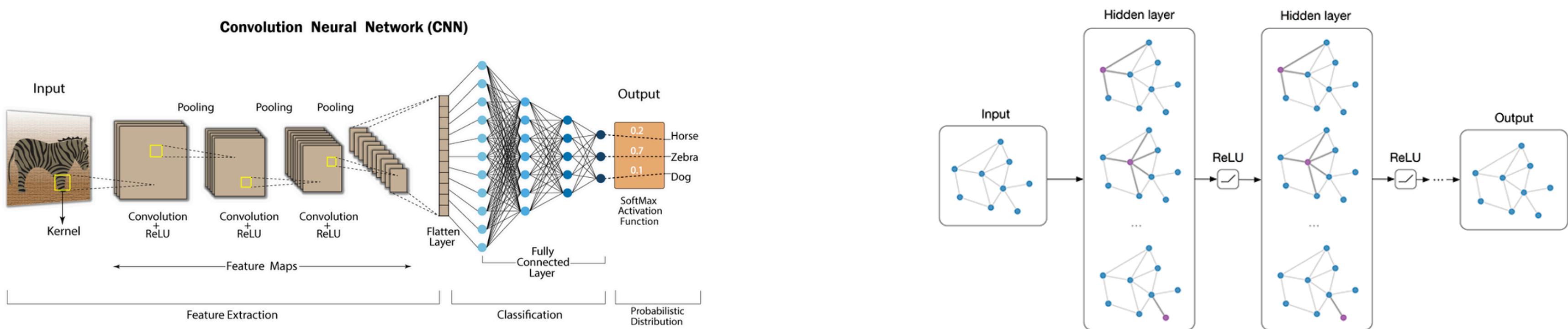


Energy vs Iteration (Model CNN, N=4)



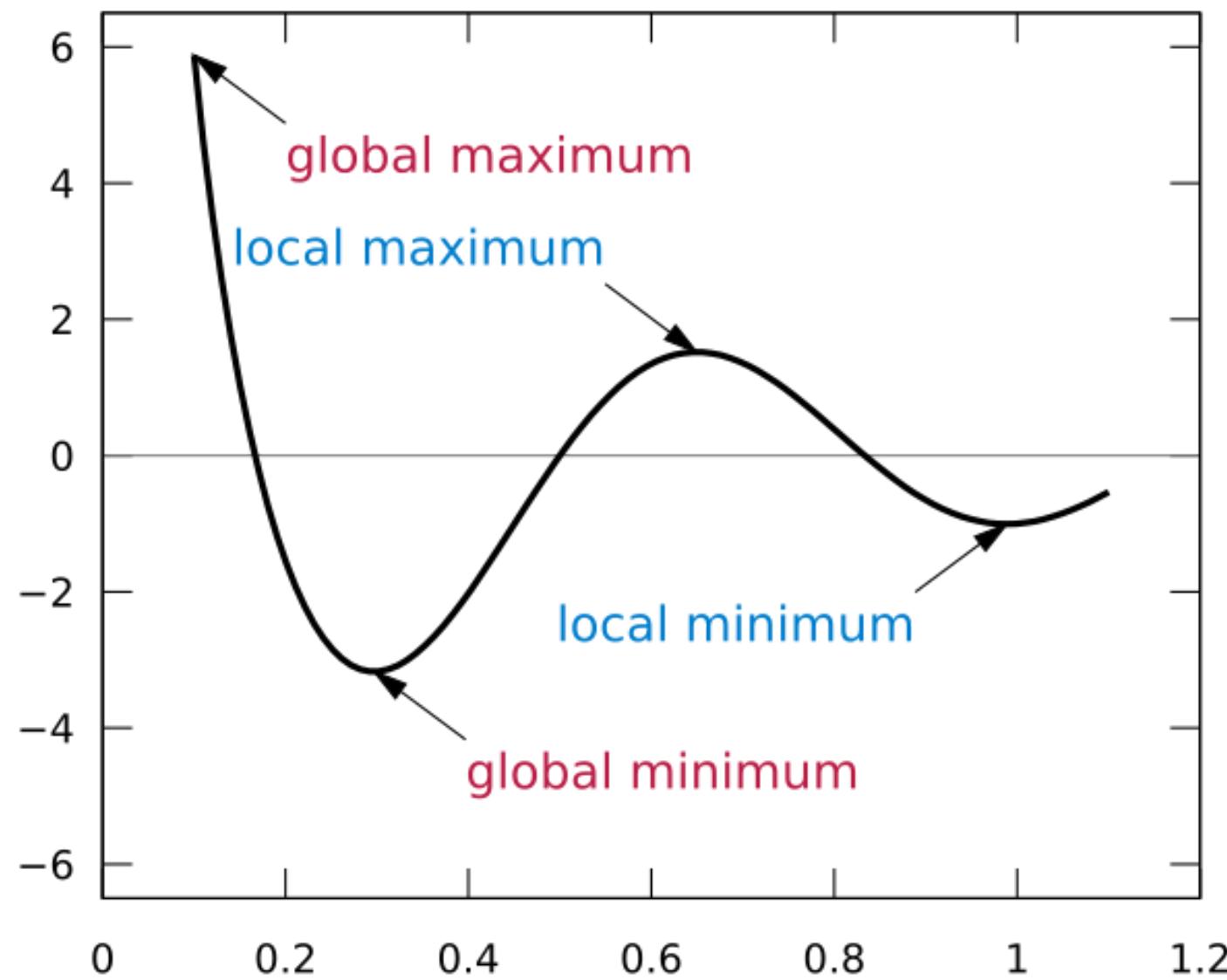
Nhưng, không thể hội tụ đúng kết quả với model NN

COMPLETE GRAPH



Không thể hội tụ ngay cả với model CNN, GNN

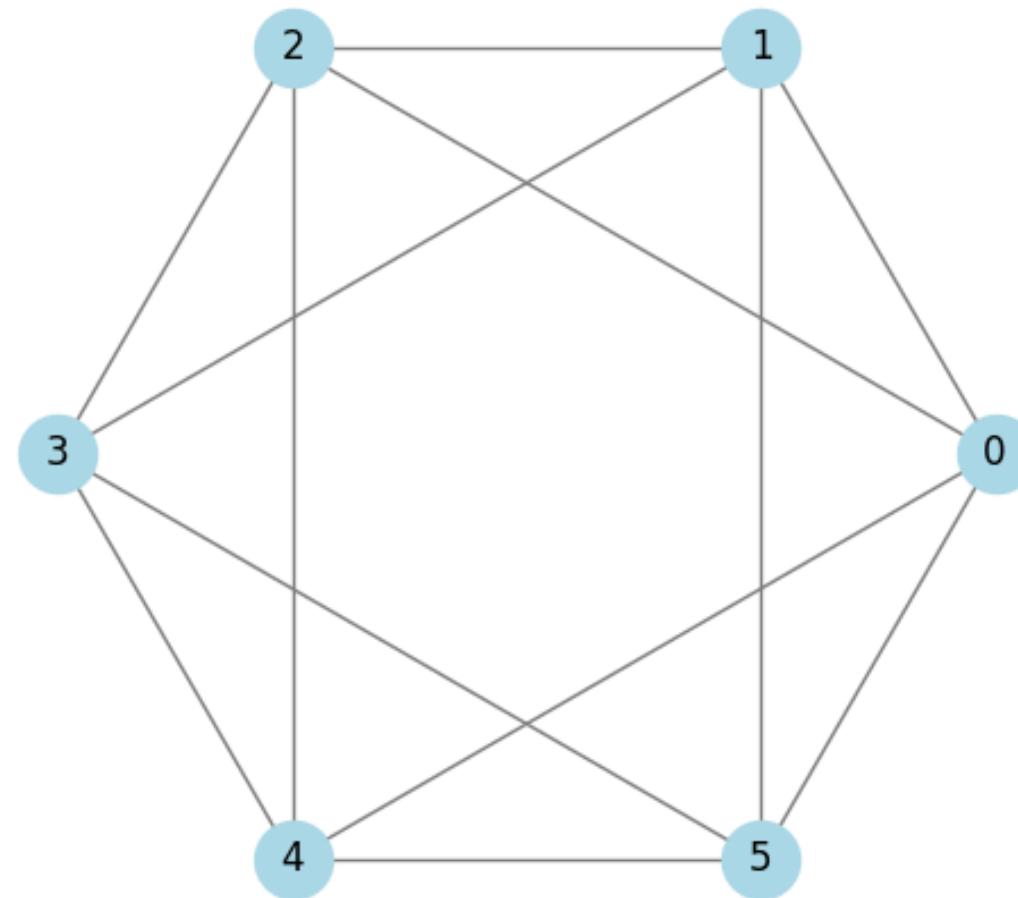
COMPLETE GRAPH



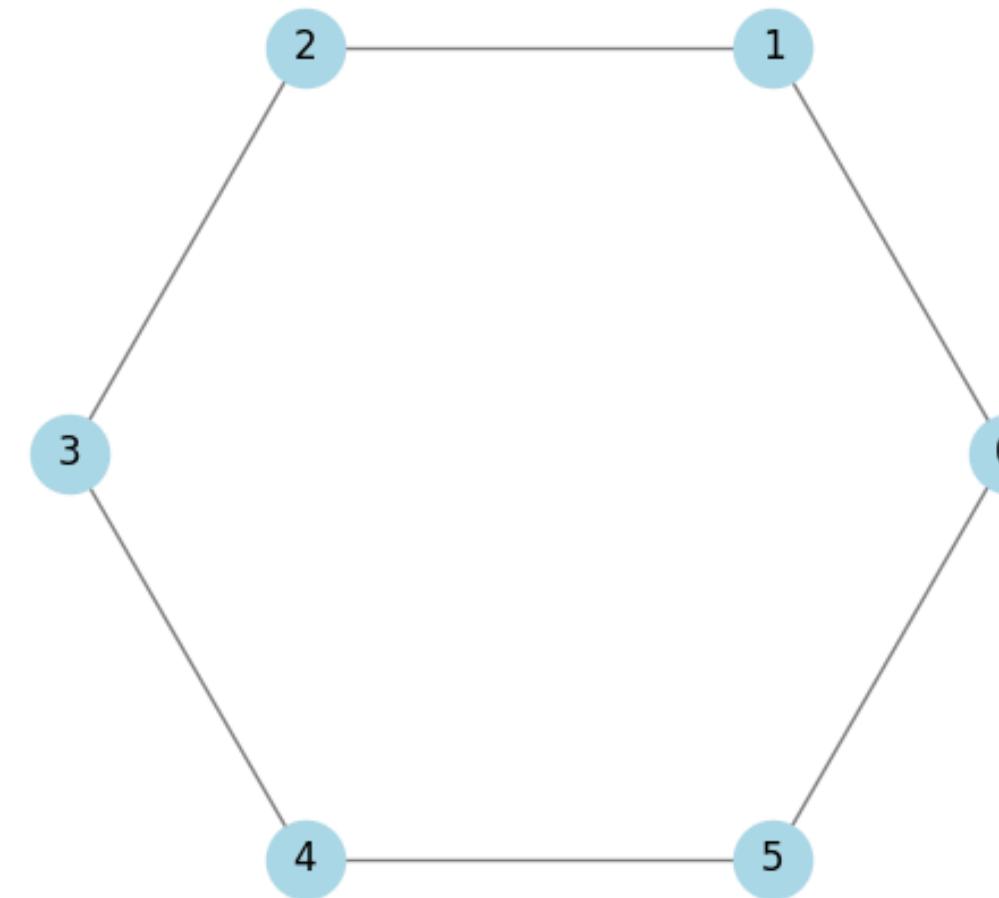
Lý do mà nhóm đề xuất:
Có thể đang bị kẹt ở local minimum

REGULAR GRAPH

4-regular Graph with 6 nodes



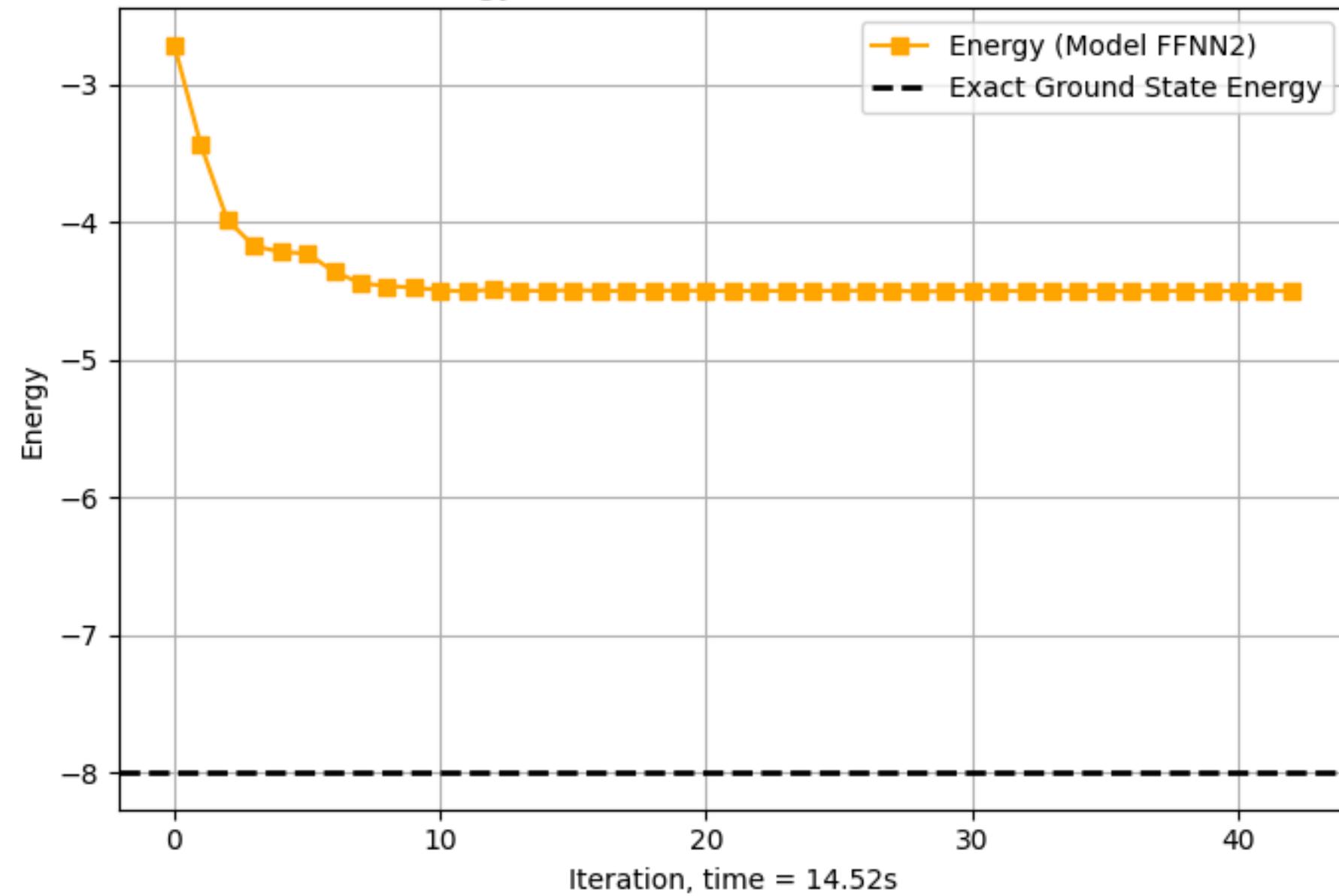
2-regular Graph with 6 nodes



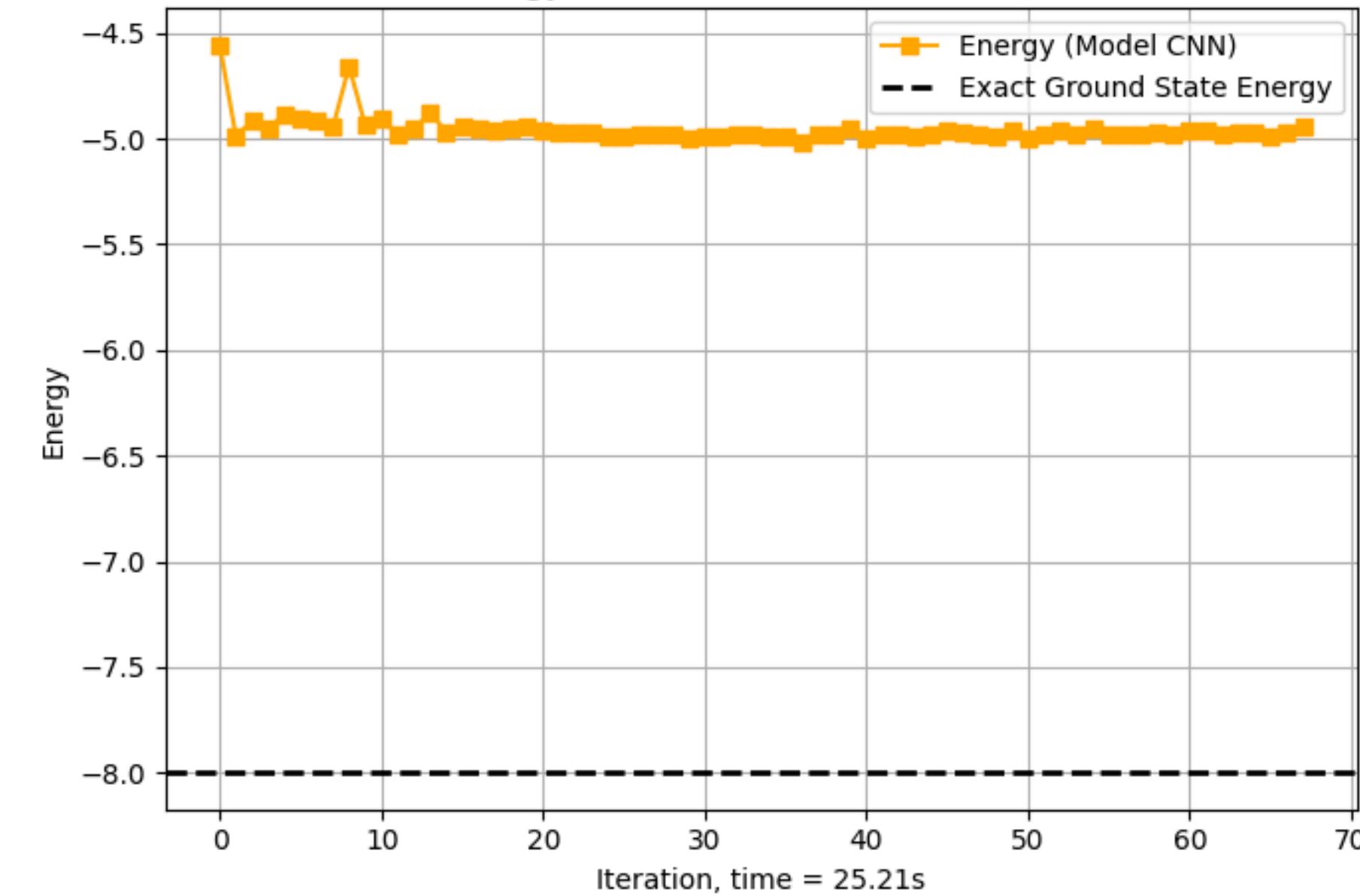
Đồ thị đã được xác định bởi số lượng đỉnh
và bậc của các đỉnh đó

REGULAR GRAPH

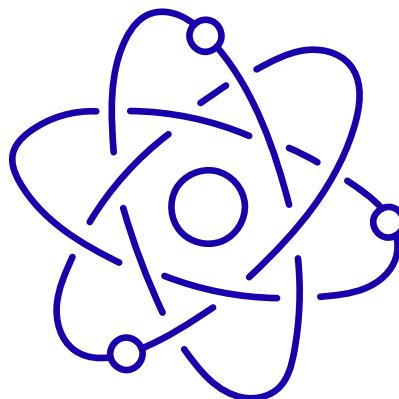
Energy vs Iteration (Model FFNN2, N=4)



Energy vs Iteration (Model CNN, N=4)

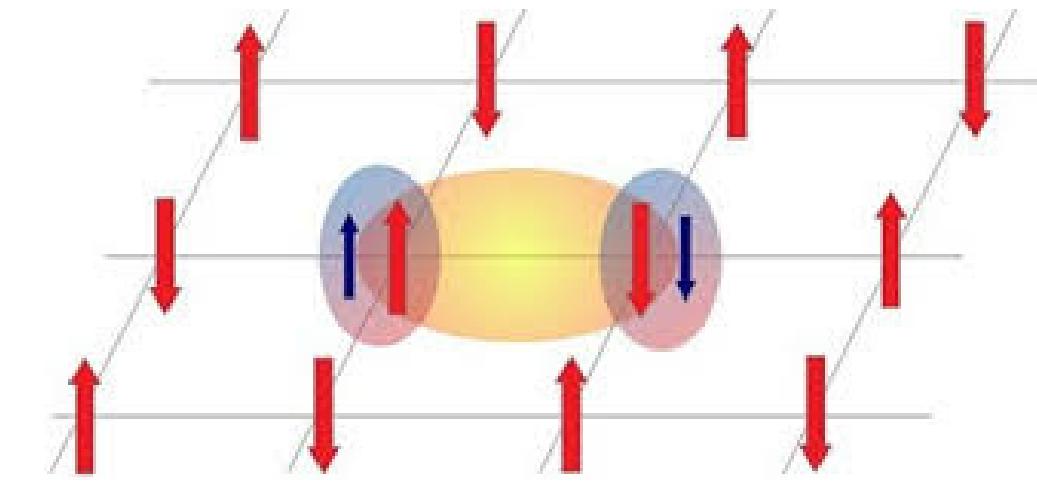


Gặp tình trạng tương tự Complete Graph
khi thử chạy bằng model FFNN2 và CNN

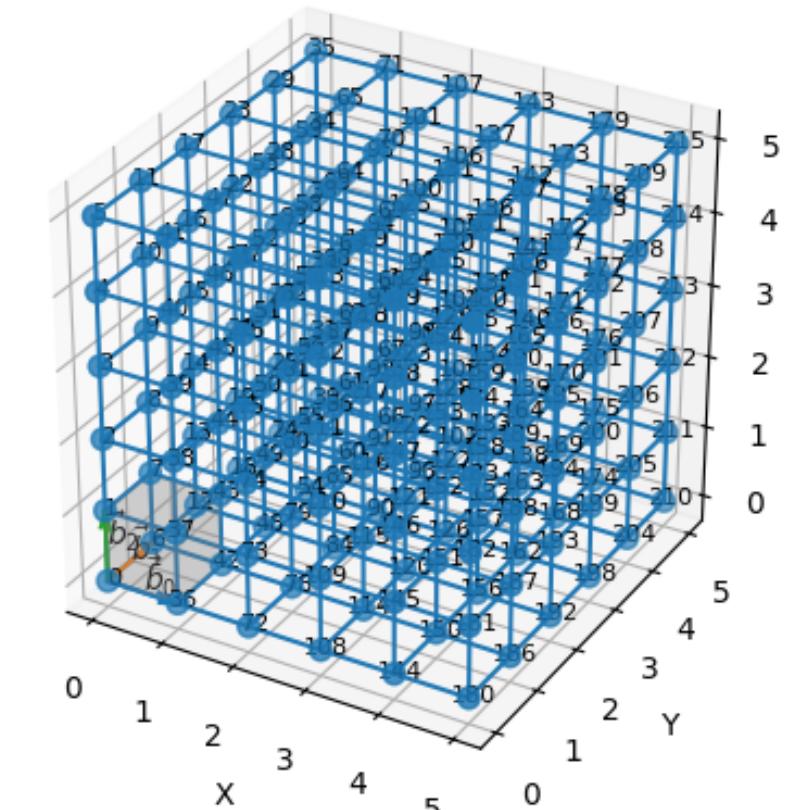


SUMMARY

- Một số khái niệm cơ bản về tính toán lượng tử
- Ứng dụng Học máy vào một số bài toán Ground State Energy
- Các bài toán thực nghiệm số cụ thể cho mô hình Heisenberg trong 1 chiều và đa chiều
- Hình dung được Graph thường gấp và cách tính Ground State Energy của nó

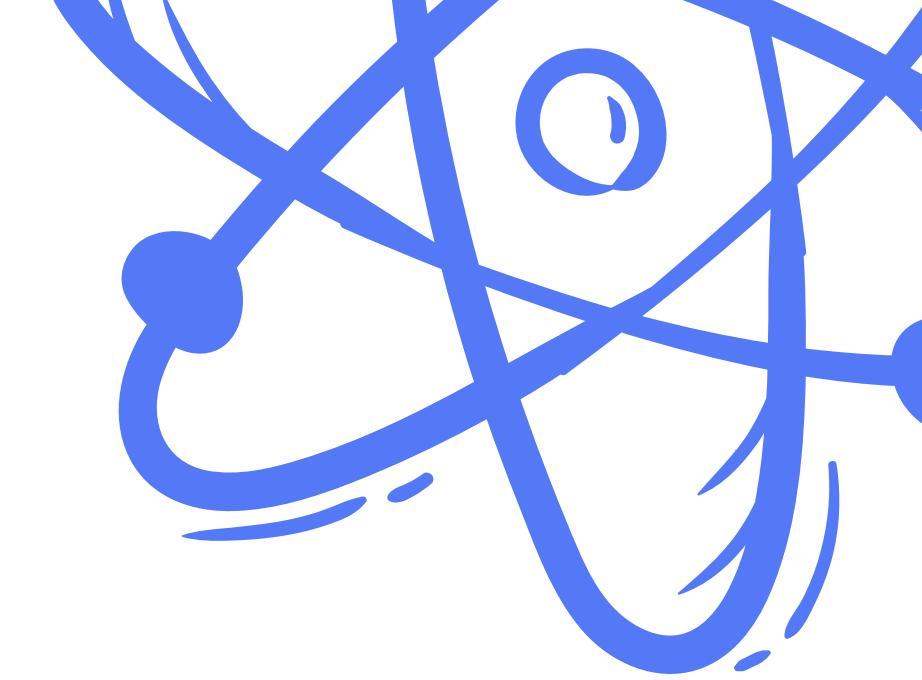
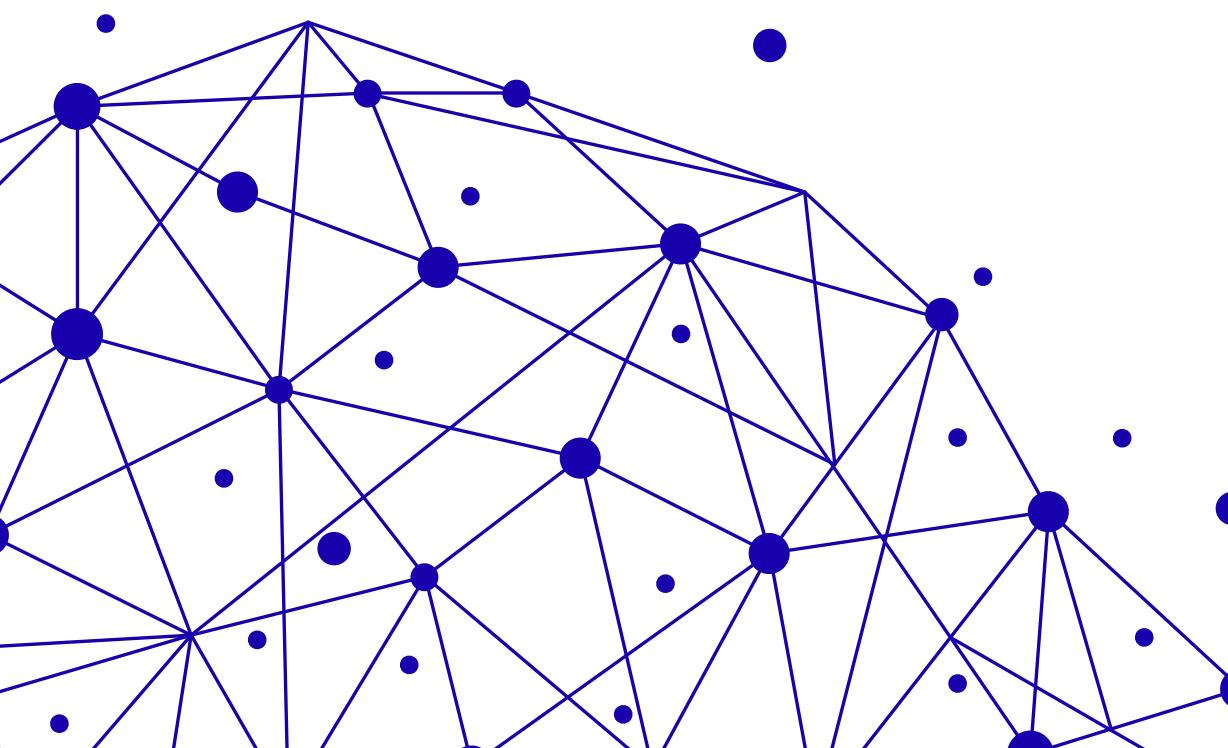


3D Lattice (Distance Order: 1)



FUTURE DIRECTIONS

- Giải bài toán Ground State Energy cho các Hamiltonians khác
- Tìm lời giải cho hệ nhiều qubits hơn (Ex: 3D với $N=4$, 4D với $N=4$)
- Tìm ra lý do cho sự không hội tụ trên đồ thị hoàn chỉnh và đồ thị ngẫu nhiên



THANK YOU FOR LISTENING!

Q & A

QUANTUM NEURAL STATE

