

به نام خدا

گزارش شماره ۱ (۴ فروردین سال ۱۳۹۹)

عنوان پروژه: بررسی مسئله درهم‌تنیدگی کوانتومی برای سیستم‌های دوزره‌ای توسط روش‌های یادگیری ماشین

اعضا: نازنین دهقان، مهکامه سلیمی، سحر تغیر، محمدمهدی ماستری فراهانی

فهرست مطالب

۳	تعمیم ماتریس‌های پاولی (ماتریس‌های گل‌مان (GELLMANN MATRIX)):
۶	نحوه ساختن ماتریس چگالی تصادفی:
۷	نحوه بدست آوردن ضرایب بسط گل‌مان از روی یک ماتریس چگالی تصادفی:
۸	تشخیص اولیه حالت‌های درهم‌تنیده و جداپذیر:
۸	تعریف PPT :
۱۰	پیاده‌سازی الگوریتم تشخیص درهم‌تنیدگی بدون استفاده از شاهدها یا PPT :
۱۱	سیستم متشکل از دو کیوتریت:
۱۱	سیستم متشکل از دو کیوبیت:
۱۲	بررسی همبستگی مقادیر اندازه‌گیری شده داده‌ها:
۱۳	منابع:

تعمیم ماتریس‌های پاولی (ماتریس‌های گلمان (GellMann matrix)):

برای نمایش حالت سیستم‌های کوانتومی بسیار مناسب است که به جای استفاده از بردار حالت، که یکی از بردارهای متعلق به فضای هیلبرت است، از ماتریس چگالی (ماتریس حالت) استفاده کنیم، چراکه توصیف کامل‌تری از سیستم ارایه می‌دهد. ماتریس چگالی یا عملگر چگالی یکی از اعضای فضای هیلبرت عملگرها است و این عملگرهای چگالی یک زیر فضا در این فضای هیلبرت می‌سازند [0].

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \rightarrow p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1$$

بنابراین واضح است که عملگر چگالی یک عملگر هرمیتی، مثبت و رد آن برابر با ۱ است.

$$\rho = \rho^\dagger, \quad \text{Tr}(\rho) = 1, \quad \langle \varepsilon_i | \rho | \varepsilon_i \rangle > 0 \quad \forall \varepsilon_i$$

برای توصیف سیستم‌های دوترازی کوانتومی، به عنوان مثال کیوبیت‌ها، می‌توان پایه‌هایی برای فضای هیلبرت عملگرهای حالتشان پیدا کرد و این پایه‌ها همان ماتریس‌های پاولی به همراه ماتریس واحد است.

$$\text{basis} = \{I, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$$

که:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

به عنوان یک توضیح مختصر از اینکه چرا می‌توان همواره هر عملگر چگالی را در این پایه بسط داد، کافی است به مثال زیر توجه کنید:

از آنجا که عملگر چگالی یک عملگر هرمیتی است می‌توان آنرا به صورت زیر نوشت:

$$\rho = \begin{pmatrix} a & b - ic \\ b + ic & d \end{pmatrix}$$

حال چون رد آن باید برابر با واحد باشد، داریم:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1+a & b-ic \\ b+ic & 1-a \end{pmatrix} = I + b\sigma_1 + c\sigma_2 + a\sigma_3$$

بنابراین در حالت کلی توانستیم یک عملگر چگالی را بر حسب ماتریس‌های چگالی بسط دهیم. نمایش ریاضی آن اینگونه خواهد بود:

$$\rho = \sum_i a_i \sigma_i$$

حال می‌خواهیم حالت یک سیستم دودره‌ای (*bipatite*) را بر حسب این پایه‌ها بنویسیم. می‌دانیم که حالت‌های دودره‌ای در فضای هیلبرت بزرگتری هستند که از ضرب تانسوری دو فضای هیلبرت هر کدام از ذره‌ها به وجود آمده‌اند. به راحتی می‌توان آن‌ها را اینگونه نشان داد:

$$\rho_{AB} \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$$

و اگر بخواهیم آن‌ها را بر حسب پایه‌های فضا (ماتریس‌های پاولی) بسط دهیم به راحتی می‌توان نوشت:

$$\rho = \sum_{i,j} a_{ij} \sigma_i \otimes \sigma_j$$

و بنابراین می‌توان هر حالت را با ضرایب بسط آن مشخص کرد. چون ماتریس‌ها پاولی هرمیتی هستند و فیزیکی هستند، این ضرایب، که در واقع از اندازه‌گیری سیستم به دست می‌آیند، باید حقیقی باشند.

اگر بخواهیم از سیستم‌های دوترازی به سیستم‌های d ترازی برویم، طبیعی به نظر می‌رسد که ماتریس‌های پاولی را تعمیم دهیم. ماتریس‌های پاولی به دو روش تعمیم داده می‌شوند که اولی ماتریس‌هایی می‌سازد که هرمیتی و بدون رد هستند (درست مانند ماتریس‌های پاولی) و دومی ماتریس‌های غیر هرمیتی می‌سازد. ما اولی را برای کارمان انتخاب می‌کنیم، چون این ماتریس‌ها هرمیتی هستند و بنابراین فیزیکی‌اند. روش تعمیم‌اشان اینگونه است که چون ماتریس‌های پاولی مولدهای گروه $SU(2)$ هستند، ماتریس‌های تعمیم یافته نیز مولدهای گروه $SU(d)$ باشند. روش ساخت ماتریس‌ها به این صورت است:

$$f_{k,j}^d = \begin{cases} E_{kj} + E_{jk} & \text{for } (k < j) \\ -i(E_{jk} - E_{kj}) & \text{for } (k > j) \end{cases}$$

$$h_k^d = \begin{cases} I_d & (k = 1) \\ h_k^{d-1} \oplus 0 & (1 < k < d) \\ \sqrt{\frac{2}{d(d-1)}} (I_{d-1} \oplus (1-d)) & (k = d) \end{cases}$$

که در آن d بعد سیستم است. به ازای $d = 2$ ماتریس‌های پاولی بدست می‌آیند و به ازای $d = 3$ ماتریس‌ها گلمان (*GellMann matrix*). به ازای بعدهای دیگر ماتریس‌های گلمان تعمیم یافته، ساخته خواهند شد. واضح است که به ازای هر d ما $d^2 - 1$ ماتریس به عنوان پایه‌های فضا به دست خواهیم آورد. یکی از آن‌ها ماتریس واحد است و بنابراین $d^2 - 1$ ماتریس گلمان به دست خواهیم آورد [1].

به ازای $d = 3$ داریم:

$$\begin{aligned} g_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad g_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad g_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ g_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad g_4 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad g_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \\ g_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad g_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad g_8 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

دلیل انتخاب این نوع ترتیب، یکسانی آن با کد پایتون مربوطه می‌باشد.

در کد تولید داده‌های یادگیری، یک تابع تعریف شده است که، از کتابخانه *pysme* برداشته شده است و ماتریس‌ها را در بعد دلخواه برای ما تولید می‌کند. تابع $gellmann(j, k, d)$ سه ورودی می‌گیرد که d همان بعد سیستم است. این تابع، ماتریس گلمان j, k را به ما می‌دهد. سپس در هنگامی که می‌خواهیم ماتریس‌های گلمان را آماده‌سازی کنیم از ضرایب j, k استفاده نخواهیم کرد، بلکه همانند بالا آن‌ها را با یک شماره مرتب می‌کنیم. تابع $gellmann_basis(d)$ که از تابع بالا استفاده می‌کند و توسط ما تعریف شده است، ماتریس‌های گلمان d بعدی را می‌سازد و درنهایت آن‌ها را تحت عنوان یک دیکشنری (*dictionary*) ذخیره می‌کند، که کلیدهای آن شماره ماتریس و اعضای آن خود ماتریس‌های گلمان

هستند. علت ذخیره کردن آن تحت عنوان دیکشنری اینست که بعدا کار با این نوع داده برای محاسبه ضرایب، شهودی تر و واضح تر است.

با این تعاریف می توانیم حالت یک سیستم d حالت را بر حسب ماتریس های گلمان تعمیم یافته، بسط دهیم:

$$\rho = \sum_i a_i g_i$$

و برای سیستم های دو ذره ای:

$$\rho = \sum_{i,j} a_{ij} g_i \otimes g_j$$

از این به بعد به این بسط، بسط گلمان می گوئیم.

نحوه ساختن ماتریس چگالی تصادفی:

برای پروژه ما نیاز داریم که تعدادی داده از پیش تعیین شده را به ماشین بدهیم تا از روی داده ها یاد بگیرد. برای تولید داده نیاز داریم که ابتدا تعدادی ماتریس تصادفی تولید کنیم تا از روی آن ها داده های خود را بسازیم. برای تولید داده های مورد استفاده، از ماتریس های چگالی تصادفی استفاده شده است که توصیف گر حالت های دو سیستم سه ترازه است. حالت های درهم تنیده یا جداپذیر این ماتریس های چگالی مشخص نیست.

برای ساخت این ماتریس ها از کتابخانه *Qutip* پایتون استفاده شده است [2]. که اساس کار این کتابخانه ساخت ماتریس های چگالی بر اساس آنسامبل های هیلبرت-اشمیت است. برای ساخت این ماتریس ها که خواص یک ماتریس چگالی را داشته باشد، لازم است ابتدا یک ماتریس مختلط تصادفی که از آنسامبل *Ginibre* پیروی می کند را انتخاب کرده و با استفاده از رابطه زیر یک ماتریس چگالی هرمیتی، مثبت و نرمال شده به دست می آید [3].

$$\rho_{hs} = \frac{AA^t}{tr(AA^t)}$$

نحوه بدست آوردن ضرایب بسط گلمان از روی یک ماتریس چگالی تصادفی:

مناسب است که نحوه بدست آوردن ضرایب بسط گلمان را از روی یک ماتریس چگالی تصادفی بدانیم، چراکه برای پروژه، ما ابتدا ماتریس‌های چگالی تصادفی را می‌سازیم و بعد آن را توسط ضرایب بسط گلمان مشخص می‌کنیم.

برای محاسبه ضرایب بسط گلمان از خصوصیت تعامد آن‌ها استفاده می‌کنیم. در حقیقت می‌دانیم که :

$$Tr(g_i g_j) = 2\delta_{ij}$$

حال داریم:

$$\left(\rho = \sum_{i,j} a_{ij} g_i \otimes g_j \right) \cdot g_k \otimes g_l \\ \rightarrow \rho(g_k \otimes g_l) = \sum_{i,j} a_{ij} g_i g_k \otimes g_j g_l$$

حال از طرفین رد می‌گیریم:

$$Tr(g_i g_k \otimes g_j g_l) = Tr(g_i g_k) \otimes Tr(g_j g_l) = 4\delta_{ik} \otimes \delta_{jl}$$

بنابراین داریم:

$$a_{ij} = \frac{1}{4} Tr(\rho(g_i \otimes g_j))$$

واضح است که به ازای سیستم 3×3 بعدی ما ۸۱ ضریب خواهیم داشت که البته یکی از آن‌ها بدیهی است. چراکه به ازای ماتریس‌های واحد، ضریب برابر ۰.۲۵ است.

$$a_{88} = \frac{1}{4} Tr(\rho(I \otimes I)) = \frac{1}{4} Tr(\rho) = 0.25$$

تشخیص اولیه حالت‌های درهم‌تنیده و جداپذیر:

برای اینکه داده‌هایی که آماده می‌کنیم، برچسب مناسب برای مسئله موردنظر را کسب کنند، نیاز داریم تعیین کنیم که داده‌های ما جداپذیر هستند یا درهم‌تنیده. البته که تعیین دقیق این حالت‌ها خود جواب مسئله است، ولی می‌توان با روش‌های موجود تعدادی را مشخص کرد و تعدادی نیز نامشخص باقی می‌مانند.

در اینجا برای تشخیص اولیه حالت‌های درهم‌تنیده، از میان روش‌های بسیاری که وجود دارند، روش پیرز-هورودوکی (*positive partial transpose – PPT*) انتخاب شده است تا برای برچسب زدن اولیه داده‌ها، به طور دقیق حالت‌های درهم‌تنیده معین شود.

تعریف *PPT*: [4]

روش پیرز-هورودوکی روش مهمی برای تشخیص درهم‌تنیدگی ماتریس‌هایی که معین کننده دو زیرسیستم A, B هستند، می‌باشد. برای ماتریس‌های با ابعاد 2×2 و 3×2 استفاده از این روش برای تشخیص حالت‌های جداپذیر و درهم‌تنیده کافی است و جواب مسئله را به طور دقیق معین می‌کند. اما برای ابعاد بالاتر، از این روش به عنوان شرط کافی نمی‌توان استفاده کرد و برای تعیین دقیق حالت‌های جداپذیر باید از روش‌هایی چون شاهدها (*Witness*) استفاده کرد [5].

اگر عملگر چگالی رو فضای $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ عمل کند، داریم:

$$\rho = \sum_{ijk} p_{kl}^{ij} |i\rangle\langle j| \otimes |k\rangle\langle l|$$

برای حالت‌های جداپذیر می‌توان ماتریس چگالی را اینگونه نوشت :

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^A \otimes \rho_i^B$$

که در آن:

$$p_i > 0 \quad , \quad \sum_i p_i = 1$$

این یک ترکیب محدب (*Convex Combination*) از عملگر چگالی‌های زیر سیستم است.

با اعمال ترانهاده جزئی بر روی حالت B داریم :

$$\rho^{TB} = \sum_i p_i \rho_i^A \otimes (\rho_i^B)^T$$

این نکته لازم به ذکر است که اگر ترانهاده جزئی بر روی زیرسیستم A نیز انجام می‌شد نتیجه مشابهی به همراه داشت.

حال چون می‌دانیم تمامی ویژه مقادیر ماتریس چگالی زیرسیستم B حتی در صورت ترانهاده شدن، همان ویژه مقادیر قبل هستند، پس انتظار می‌رود که ویژه مقادیر ماتریس چگالی کل بعد از اعمال ترانهاده جزئی کماکان مثبت باقی بماند و در صورتی که این ویژه مقادیر منفی شود نمایانگر این است که فرض اولیه برای نوشتن ماتریس چگالی به عنوان ترکیب محدب ماتریس‌های چگالی زیرسیستم‌های A, B (فرض جدا پذیر بودن) نقض می‌شود و می‌توان نتیجه گرفت که حالت‌های موجود درهم‌تنیده هستند [4]. اما در صورت مثبت بودن ضرایب، چون PPT شرط کافی نیست، (برای سیستم‌های با ابعاد بیشتر از 3×2) نمی‌توان نتیجه گرفت که حالت مد نظر جداپذیر است و حالت ناشناخته باقی می‌ماند.

برای پیاده سازی این الگوریتم در برنامه، یک تابع PPT را تعریف کردیم. سپس با استفاده توابع موجود در کتابخانه *Qutip* از قبیل *partial_transpose* از ماتریس چگالی تصادفی خود یک ترانهاده جزئی گرفتیم (نسبت به یکی از زیر سیستم‌ها). واضح است که برای الگوریتم فوق، فرقی ندارد که نسبت به کدام زیر سیستم ترانهاده جزئی بگیریم. سپس این ماتریس چگالی بدست آمده یک $Qobj$ است که در واقع یکی از اشیای کتابخانه *Qutip* است. این شی یک متد دارد به نام *eigenstates* که خروجی آن به صورت یک لیست است که خود شامل دو لیست درونی است. لیست اول ویژه مقادیر مربوط به ترانهاده جزئی ماتریس چگالی است. این لیست خود به خود از کوچک به بزرگ مرتب شده است و بنابراین کافی است که فقط عضو ابتدایی آن مشخص شود. اگر منفی بود که حالت درهم‌تنیده است و در غیر اینصورت ناشناخته باقی می‌ماند.

همچنین برای ساختن ماتریس‌های چگالی تصادفی جدایی‌پذیر ما از تعریف استفاده کردیم. از آنجا که هر حالت جدایی‌پذیر را می‌توان بر حسب یک ترکیب محدب از زیر سیستم‌های مختلف نوشت، ما می‌توانیم تعدادی از این ماتریس‌ها را بسازیم. ابتدا نیاز داریم که تعدادی ماتریس چگالی تصادفی بسازیم که بُعد آن‌ها برابر با بُعد زیرسیستم‌ها باشد. سپس باید تعدادی از آن‌ها را به صورت تصادفی انتخاب کنیم. اینکار را تابع *choice* از کتابخانه *random* انجام می‌دهد. حال باید تعدادی عدد مثبت بیابیم که مجموع همه آن‌ها برابر ۱ باشند. در حقیقت این اعداد برای ما نقش ضرایب احتمال را بازی می‌کنند. مناسب است که از تابع *np.random.dirichlet* استفاده کنیم که در واقع در کتابخانه *numpy* یافت می‌شود. بعد از تمام این‌ها کافی است که ماتریس‌ها را به ترتیب در هم ضرب تانسوری کرده و با اعداد تصادفی تولید شده ضرب کرده و در نهایت همه را با هم جمع بزنیم. برای این منظور ما تابع *Convex_Combination* را در کد خود تعریف کردیم.

برای مشخص کردن حالات روش دیگری موسوم به روش *CHA (Convex Hull approximation)* وجود دارد که توضیحات مربوط به آن در ادامه می‌آید.

پیاده‌سازی الگوریتم تشخیص درهم‌تنیدگی بدون استفاده از شاهدها یا *PPT*:

برای درک این الگوریتم و پیاده‌سازی آن از مقاله‌ی [6] بهره بردیم.

در اولین قدم برای آن که بتوانیم از روش‌های یادگیری ماشین برای تشخیص درهم‌تنیدگی سیستم استفاده کنیم، لازم است تعداد زیادی ماتریس چگالی تصادفی تولید کرده و با الگوریتم‌هایی مشخص کنیم که این حالت‌ها درهم‌تنیده هستند یا جدایی‌پذیر. سپس ماشین را با این ماتریس‌ها *learn* می‌کنیم تا بتواند حالت‌های نامشخص برای ما را هم تشخیص دهد.

باید ابتدا ماتریس‌های تصادفی را برچسب بزنیم تا بتوانیم فرآیند یادگیری را شروع کنیم. برای این منظور از این الگوریتم استفاده کردیم:

می‌دانیم حالت‌های جدایی‌پذیر یک *convex hull* تشکیل می‌دهند که مرز آن حالت‌های خالص جدایی‌پذیر هستند [7].

بنابراین ابتدا با مجموعه‌ای از حالت‌های خالص جدایی‌پذیر، یک *convex hull* ساختیم برای آن که بتوانیم به گونه‌ای این زیرفضا را شبیه‌سازی کنیم. بعد از آن هر ماتریس چگالی تصادفی را با بررسی این که آیا در این *convex hull* هست یا خیر برچسب می‌زنیم. بودن یک حالت در این *convex hull* معادل جدایی‌پذیر بودن آن است.

سیستم متشکل از دو کیوتریت:

لازم به ذکر است که ما در فضای *Feature vector* های هر ماتریس چگالی این کار را انجام می‌دهیم. *Feature vector* های حالت‌های مختلف، همان ضرایب بسط گلمان به دست آمده برایشان هستند. بُعد این فضا برای یک سیستم دو کیوتریتی ۸۱ است.

برای آن که بتوانیم یک *convex hull* بسازیم، پس از تولید ضرایب بسط گلمان ۸۲ ماتریس چگالی خالص، از توابع *convex hull* و *Delaunay* در کتابخانه‌ی *Scipy* استفاده کردیم.

با استفاده از تابعی که تشخیص می‌دهد آیا نقطه‌ای در یک *convex hull* هست یا نه، تلاش کردیم سیستم دو کیوتریتی را مورد بررسی قرار دهیم اما دچار مشکلاتی شد که نتوانستیم برنامه را اجرا کنیم.

سیستم متشکل از دو کیوبیت:

به دلیل مشکل پیش آمده تصمیم گرفتیم ابعاد سیستم را کم کنیم تا بتوانیم کد را تست کنیم، بنابراین با دو کیوبیت کار کردیم. فضای حالت در این صورت ۱۶ بعدی است.

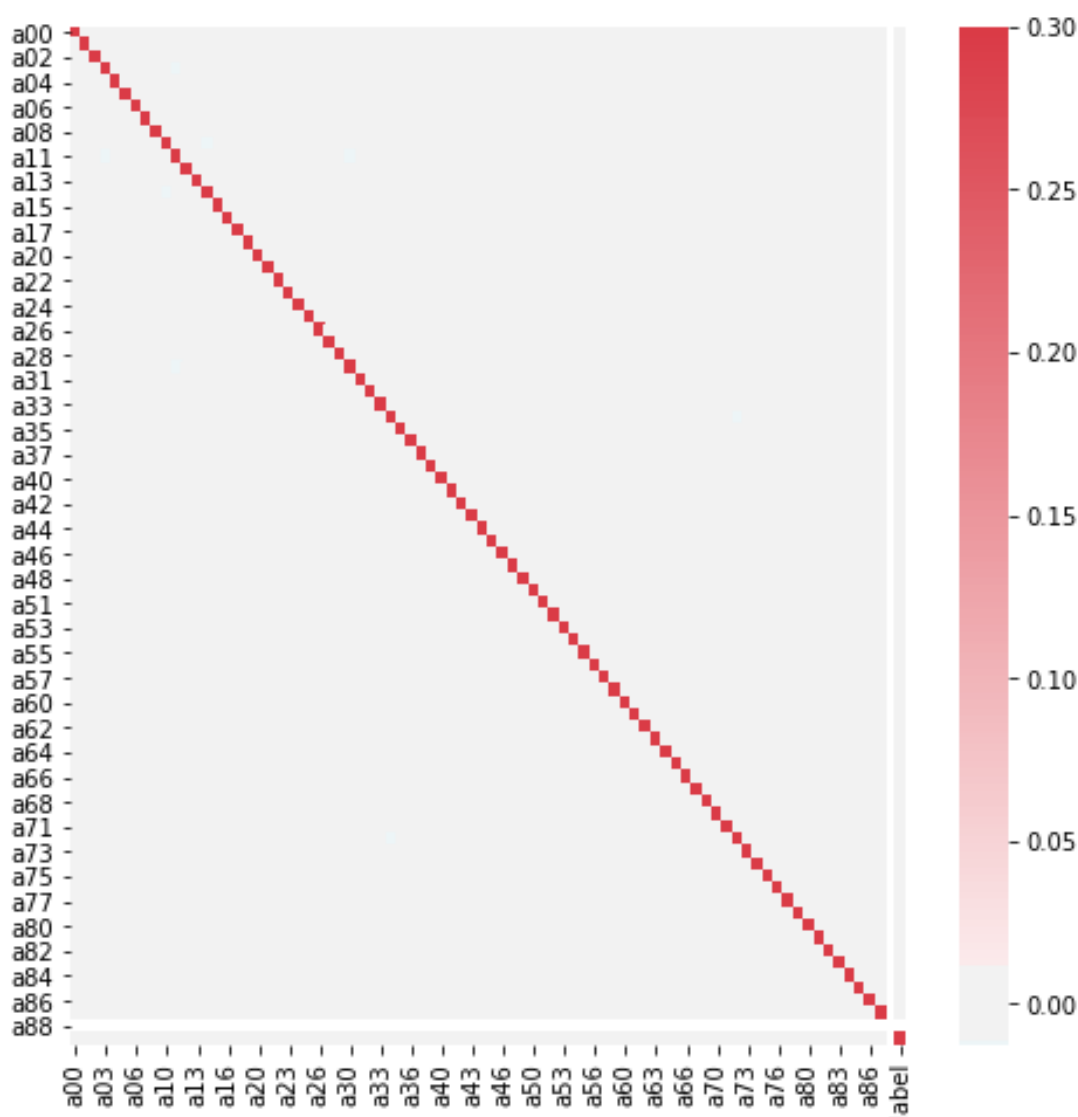
تعدادی ماتریس چگالی خالص ۴ در ۴ تولید کردیم و ضرایب بسط آن‌ها برحسب ماتریس‌های پائولی را به دست آوردیم.

convex hull را با استفاده از *Feature vector* این ماتریس‌ها ساختیم و با تابع *Delaunay* بررسی کردیم که آیا یک حالت آزمایشی شناخته شده در *convex hull* هست یا خیر. خروجی تابع نهایی *true* برای حالت جدایی‌پذیر و *false* برای حالت درهم‌تنیده است.

بررسی همبستگی مقادیر اندازه‌گیری شده داده‌ها:

برای ۲۰۰۰۰ دیتا فریم به دست آمده که شامل ضرایب بسط ماتریس‌های گل‌مان هستند و برچسب گذاری شده‌اند، تابع همبستگی را چک کرده و نمایش داده‌ایم.

با توجه به *heatmap* رسم شده می‌توان دریافت که همبستگی بین ضرایب و برچسب گذاری‌ها صفر است. همچنین با افزایش تعداد داده‌های مورد بررسی می‌توان مشاهده کرد که مطابق انتظار به طور کامل این همبستگی صفر می‌شود.



نصویر ۱: این تصویر نشان دهنده اینست که همبستگی بین مشخصات داده‌ها و برچسب صفر است.

- [0] Phys. Rev. A 70, 060303(R) (2004)
- [1] https://en.wikipedia.org/wiki/Generalizations_of_Pauli_matrices
- [2] qutip.org/docs/4.1/apidoc/functions.html
- [3] [Karol Życzkowski, Generating random density matrices.5](#)
- [4] A. Peres, Phys. Rev. Lett. **76** (1997) 1413.
- [5] M. Horodecki, P. Horodecki and R. Horodecki Phys. Lett. A 22 (1996) 1.
- [6] Sirui Lu, A Separability-Entanglement Classifier via Machine Learning. (2017)
- [7] M. A. Jafarizadeh, Two-qutrit Entanglement Witnesses and Gell-Mann Matrices. (2008)