به نام خدا

گزارش شماره ۱ (۴ فروردین سال ۱۳۹۹)

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

اعضا: سیده فاطمه دهقان، مهکامه سلیمی، سحر تغیر، محمدمهدی ماستری فراهانی

فهرست مطالب

٣	تعمیم ماتریسهای پاولی(ماتریسهای گلمان(GELLMANN MATRIX)):
٦	نحوه ساختن ماتریس چگالی تصادفی:
Y	نحوه بدست آوردن ضرایب بسط گلمان از روی یک ماتریس چگالی تصادفی:
۸	تشخیص اولیه حالتهای درهم تنیده و جداپذیر:
۸	تعریف PPT:
1+	پیادهسازی الگوریتم تشخیص درهم تنیدگی بدون استفاده از شاهدها یا PPT :
	سیستم متشکل از دو کیوتریت:
))	سیستم متشکل از دو کیوبیت:
١٢	بررسی همبستگی مقادیر اندازه گیری شده دادهها:
١٣	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 کامل تری از سیستم ارایه می دهد. ماتریس چگالی یا عملگر چگالی یکی از اعضای فضای هیلبرت عملگرها است و این عملگرهای چگالی یک زیر فضا در این فضای هیلبرت می سازند [0].

$$ho = \sum_i p_i |\psi_i
angle \langle \psi_i |
ightarrow p_i \geq 0$$
 , $\sum_i p_i = 1$

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

$$ho=
ho^{\dagger}$$
 , $Tr(
ho)=1$, $\langle arepsilon_i |
ho | arepsilon_i
angle >0$ $orall arepsilon_i$

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.

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

که:

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

به عنوان یک توضیح مختصر از اینکه چرا می توان 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 می توان 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 دوذرهای (bipatite) را برحسب این پایهها بنویسیم. میدانیم که حالتهای دوذرهای 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 می توان هر حالت را با ضرایب بسط آن مشخص کرد. چون ماتریسها پاولی هرمیتی هستند و فیزیکی هستند، این ضرایب، که در واقع از اندازه گیری سیستم به دست می آیند، باید حقیقی باشند.

اگر بخواهیم از سیستمهای دوترازی به سیستمهای d ترازی برویم، طبیعی به نظر می رسد که ماتریسهای پاولی را تعمیم دهیم. ماتریسهای پاولی به دو روش تعمیم داده می شوند که اولی ماتریسهایی می سازد که هرمیتی و بدون رد هستند (درست مانند ماتریسهای پاولی) و دومی ماتریسهای غیر هرمیتی می سازد. ما اولی را برای کارمان انتخاب می کنیم، چون این ماتریسها هرمیتی هستند و بنابراین فیزیکی اند. روش تعمیم اشان 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:

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

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

d=3 ماتریسهای پاولی بدست می آیند و به ازای d=2 ماتریسهای پاولی بدست می آیند و به ازای و ماتریسهای گلمان تعمیم یافته، ماتریسها گلمان تعمیم یافته، d=1 (GellMann matrix). به ازای بعدهای دیگر ماتریسهای گلمان تعمیم یافته، ساخته خواهند شد. واضح است که به ازای هر d=1 ماتریس به عنوان پایههای فضا به دست خواهیم آورد d=1. آورد. یکی از آنها ماتریس واحد است و بنابراین d=1 ماتریس گلمان به دست خواهیم آورد d=1.

به ازای d=3 داریم:

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

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 می کند. تابع gellmann(j,k,d) سه ورودی می گیرد که می خواهیم همان بعد سیستم است. این تابع، ماتریس گلمان j,k را به ما می دهد. سپس در هنگامی که می خواهیم ماتریسهای گلمان را آماده سازی کنیم از ضرایب j,k استفاده نخواهیم کرد، بلکه همانند بالا آنها را با یک شماره مرتب می کنیم. تابع $gellmann_basis(d)$ که از تابع بالا استفاده می کند و توسط ما تعریف شده است، ماتریسهای گلمان d بعدی را می سازد و درنهایت آنها را تحت عنوان یک دیکشنری شماره ماتریسهای گلمان آن شماره ماتریس و اعضای آن خود ماتریسهای گلمان گلمان گلمان گلمان گلمان 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 حالته را بر حسب ماتریسهای گلمان تعمیم یافته، بسط دهیم:

$$\rho = \sum_{i} a_i \ g_i$$

و برای سیستمهای دو ذرهای:

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

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

نحوه ساختن ماتریس چگالی تصادفی:

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

برای ساخت این ماتریسها از کتابخانه Qutip پایتون استفاده شده است [2]. که اساس کار این کتابخانه ساخت ماتریسهای چگالی بر اساس آنسامبلهای هیلبرت–اشمیت است. برای ساخت این ماتریسها که خواص یک ماتریس چگالی را داشته باشد، لازم است ابتدا یک ماتریس مختلط تصادفی که از آنسامبل خواص یک ماتریس چگالی هرمیتی, مثبت و 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 می کنیم.

برای محاسبه ضرایب بسط گلمان از خصوصیت تعامد آنها استفاده می کنیم. در حقیقت می دانیم که:

$$Tr(g_ig_j)=2\delta_{ij}$$

حال داريم:

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

$$\to \rho(g_k \otimes g_l) = \sum_{i,j} a_{ij} g_i g_k \otimes g_j g_l$$

حال از طرفین رد می گیریم:

$$Tr(g_ig_k \otimes g_jg_l) = Tr(g_ig_k) \otimes Tr(g_jg_l) = 4\delta_{ik} \otimes \delta_{jl}$$

بنابراین داریم:

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

واضح است که به ازای سیستم ۳×۳ 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 درهم تنیده و جدایذیر:

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

در اینجا برای تشخیص اولیه حالتهای درهم تنیده, از میان روش های بسیاری که وجود دارند، روش پیرز وش برچسب زدن هورودو کی (positive partial transpose -PPT) انتخاب شده است تا برای برچسب زدن اولیه دادهها، به طور دقیق حالتهای درهم تنیده معین شود.

تعریف PPT: [4]

روش پیرز- هوردوکی روش مهمی برای تشخیص درهم تنیدگی ماتریسهایی که معین کننده دو زیرسیستم A,B هستند، میباشد. برای ماتریسهای با ابعاد $T \times T$ و $T \times T$ استفاده از این روش برای تشخیص حالتهای جدا پذیر و درهم تنیده کافی است و جواب مسئله را به طور دقیق معین می کند. اما برای ابعاد بالاتر، از این روش به عنوان شرط کافی نمی توان استفاده کرد و برای تعیین دقیق حالتهای جداپذیر باید از روشهایی چون شاهدها (Witness) استفاده کرد [5].

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

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

برای حالتهای جدایذیر می توان ماتریس چگالی را اینگونه نوشت:

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

که در آن:

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

این یک ترکیب محدب ($Convex\ Combination$) از عملگر چگالیهای زیر سیستم است. B داریم :

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

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

حال چون می دانیم تمامی ویژه مقادیر ماتریس چگالی زیرسیستم B حتی در صورت ترانهاده شدن، همان ویژه مقادیر قبل هستند، پس انتظار می رود که ویژه مقادیر ماتریس چگالی کل بعد از اعمال ترانهاده جزیی 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 ماتریس های چگالی زیرسیستمهای A, B (فرض جدا پذیر بودن) نقض می شود و می توان نتیجه گرفت که حالتهای موجود در هم تنیده هستند A اما در صورت مثبت بودن ضرایب، چون A شرط کافی نیست، (برای سیستمهای با ابعاد بیشتر از A نمی توان نتیجه گرفت که حالت مد نظر جداپذیر است و حالت ناشناخته باقی می ماند.

برای پیاده سازی این الگوریتم در برنامه، یک تابع PPT را تعریف کردیم. سپس با استفاده توابع موجود در کتابخانه Qutip از قبیل Qutip از قبیل $Partial_transpose$ از ماتریس چگالی تصادفی خود یک ترانهاده جزیی گرفتیم (نسبت به یکی از زیر سیستمها). واضح است که برای الگوریتم فوق، فرقی ندارد که نسبت به کدام زیر سیستم ترانهاده جزیی 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 Partial که خروجی آن به صورت از اشیای کتابخانه Partial است. این شی یک متد دارد به نام Partial که خروجی آن به صورت یک لیست است که خود شامل دو لیست درونی است. لیست اول ویژه مقادیر مربوط به ترانهاده جزیی 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 در هم تنیده است و در غیر اینصورت ناشناخته باقی می ماند.

همچنین برای ساختن ماتریسهای چگالی تصادفی جدایی پذیر ما از تعریف استفاده کردیم. از آنجا که هر حالت جداییپذیر را می توان بر حسب یک ترکیب محدب از زیر سیستمهای مختلف نوشت، ما می توانیم 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 می دهد. حال باید تعدادی عدد مثبت بیابیم که مجموع همه آنها برابر ۱ باشند. در حقیقت این اعداد برای ما نقش ضرایب احتمال را بازی می کنند. مناسب است که از تابع برابر ۱ باشند. در حقیقت این اعداد برای ما نقش ضرایب احتمال را بازی می کنند. مناسب است که از تابع می شود. بعد از مناسب است که ماتریسها را به ترتیب در هم ضرب تانسوری کرده و با اعداد تصادفی تولید شده 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 (Convex Hull approximation) وجود دارد که توضیحات مربوط به آن در ادامه می آید.

پیادهسازی الگوریتم تشخیص درهم تنید کی بدون استفاده از شاهدها یا PPT:

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

در اولین قدم برای آن که بتوانیم از روشهای یادگیری ماشین برای تشخیص درهم تنیدگی سیستم استفاده کنیم، لازم است تعداد زیادی ماتریس چگالی تصادفی تولید کرده و با الگوریتمهایی مشخص کنیم که این حالتها درهم تنیده هستند یا جدایی پذیر. سپس ماشین را با این ماتریسها learn می کنیم 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 محدادر این convex hull آیا در این حالت در این convex hull هست یا خیر برچسب میزنیم. بودن یک حالت در این است.

سیستم متشکل از دو کیوتریت:

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

برای آن که بتوانیم یک $convex\ hull\ variable$ بسازیم، پس از تولید ضرایب بسط گلمان $convex\ hull\ variable$ ماتریس چگالی خالص، از توابع $convex\ hull\ variable$ و $convex\ hull\ variable$ در کتابخانهی $convex\ hull\ variable$ استفاده کردیم.

با استفاده از تابعی که تشخیص میدهد آیا نقطهای در یک convex hull هست یا نه، تلاش کردیم سیستم دوکیوتریتی 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.

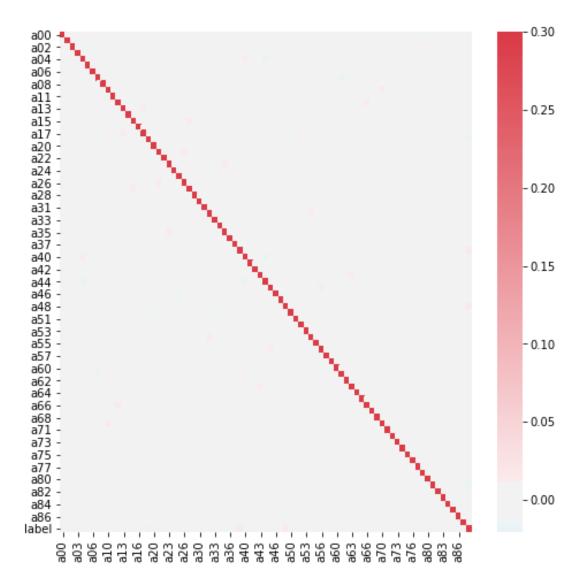
تعدادی ماتریس چگالی خالص ۴ در ۴ تولید کردیم و ضرایب بسط آنها برحسب ماتریسهای پائولی را به دست آوردیم.

Delaunay این ماتریسها ساختیم و با تابع $Feature\ vector$ این ماتریسها ساختیم و با تابع $Feature\ vector$ بررسی کردیم که آیا یک حالت آزمایشی شناخته شده در False برای حالت جدایی پذیر و False برای حالت درهم تنیده است.

بررسی همبستگی مقادیر اندازه گیری شده دادهها:

برای 100 000 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 می توان دریافت که همبستگی بین ضرایب و برچسب گذاری ها صفر است. همچنین با افزایش تعداد داده های مورد بررسی می توان مشاهده کرد که مطابق انتظار به طور کامل این همبستگی صفر می شود.



تصویر 1: در این تصویر، که یک نقشه حرارتی از میزان همبستگی ویژگیهای دادهها با هم میباشد، مشاهده می کنید که هیچ ویژگی از دادهها با هم همبستگی ندارد. با هم همبستگی ندارد و از آن مهمتر اینکه ویژگیهای دادهها با هم

منابع:

- [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 Zyczkowski, 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)