



# Тензорные сети и машинное обучение для динамических и стационарных квантовых систем

Лучников Илья Андреевич



# План



1. Тензорные сети в квантовой механике
2. Подходы к описанию открытых квантовых систем
3. Временная сеть резервуара и эффективное окружение квантовой системы
4. Машинное обучение для марковского вложения
5. Квантовая динамика в стробоскопическом пределе
6. Вариационный автокодировщик для восстановления состояния многочастичной квантовой системы



## Понижение размерности двусоставной квантовой системы

Вектор состояния

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle$$

$$\psi \in \mathbb{C}^{n \times m}, n \geq m$$



## Понижение размерности двусоставной квантовой системы

Вектор состояния

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle$$

$$\psi \in \mathbb{C}^{n \times m}, n \geq m$$

Сингулярное  
разложение

$$\psi_{ij} = \sum_k U_{ik} \Lambda_k V_{kj}^\dagger$$

$$UU^\dagger = P, U^\dagger U = I$$

$$V^\dagger V = VV^\dagger = I$$



# Понижение размерности двусоставной квантовой системы

Вектор состояния

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle$$

$$\psi \in \mathbb{C}^{n \times m}, n \geq m$$

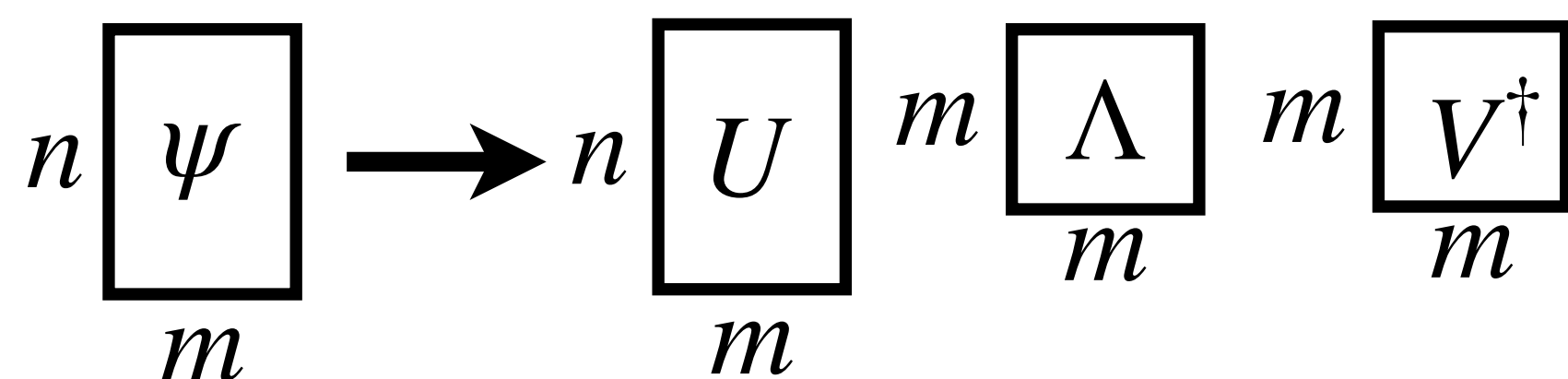
Сингулярное разложение

$$\psi_{ij} = \sum_k U_{ik} \Lambda_k V_{kj}^\dagger$$

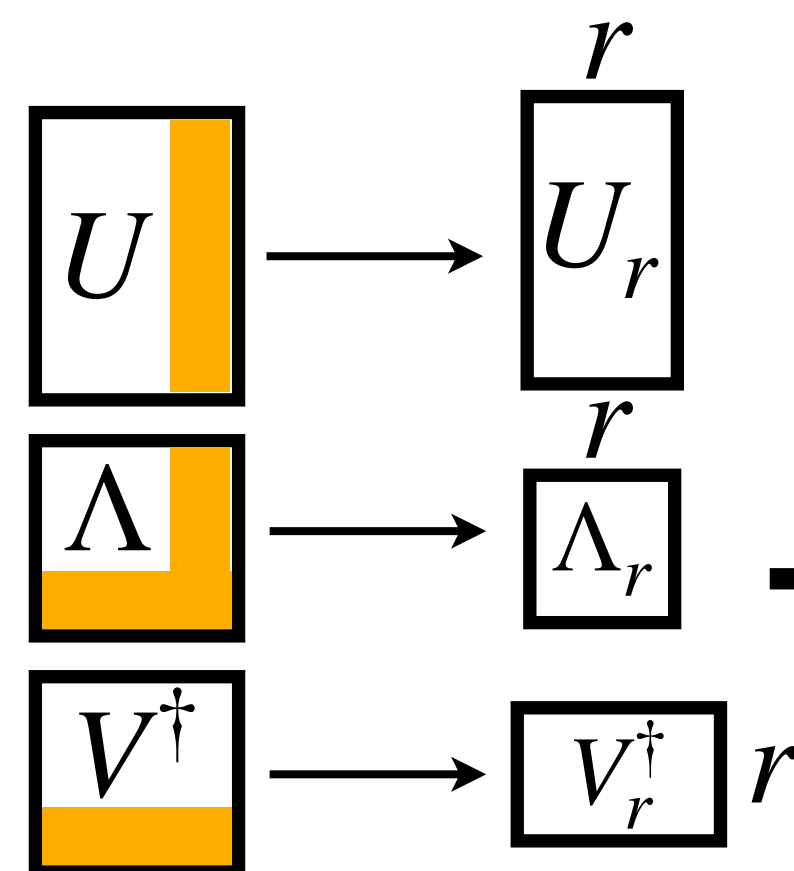
$$UU^\dagger = P, U^\dagger U = I$$

$$V^\dagger V = VV^\dagger = I$$

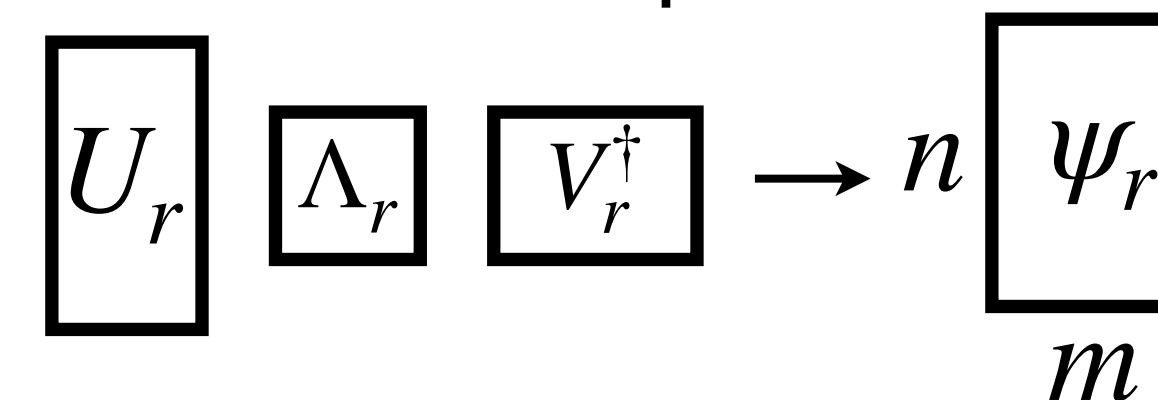
1. Сингулярное разложение



2. Усечение матриц



3. Расчет матрицы меньшего ранга





# Понижение размерности двусоставной квантовой системы

Вектор состояния

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle$$

$$\psi \in \mathbb{C}^{n \times m}, n \geq m$$

Новое квантовое состояние «дешевле» хранить в виде матриц

$$\psi \rightarrow U_r, \Lambda_r, V_r^\dagger$$
$$nm \rightarrow nr + rm + r$$

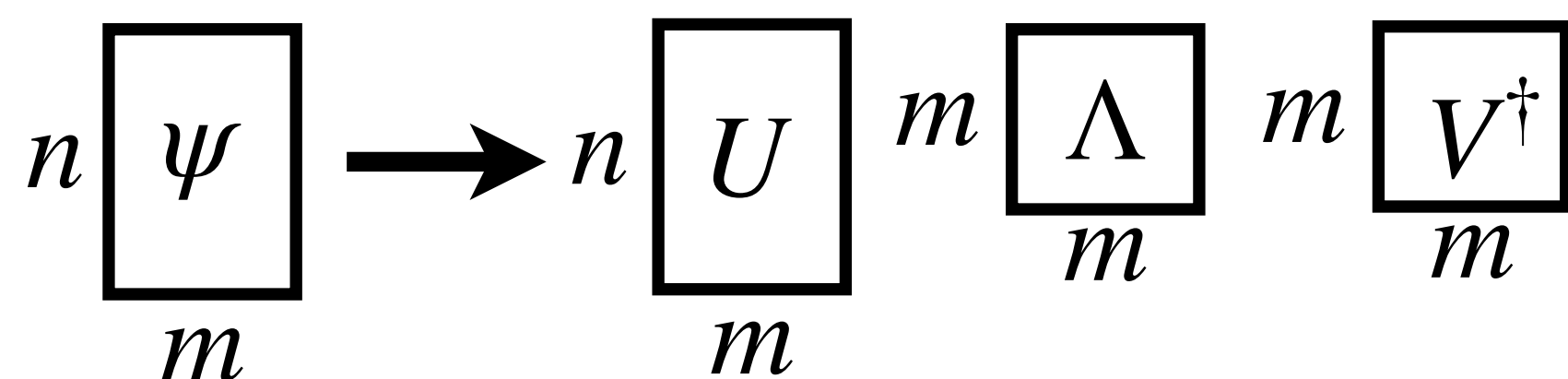
Сингулярное разложение

$$\psi_{ij} = \sum_k U_{ik} \Lambda_k V_{kj}^\dagger$$

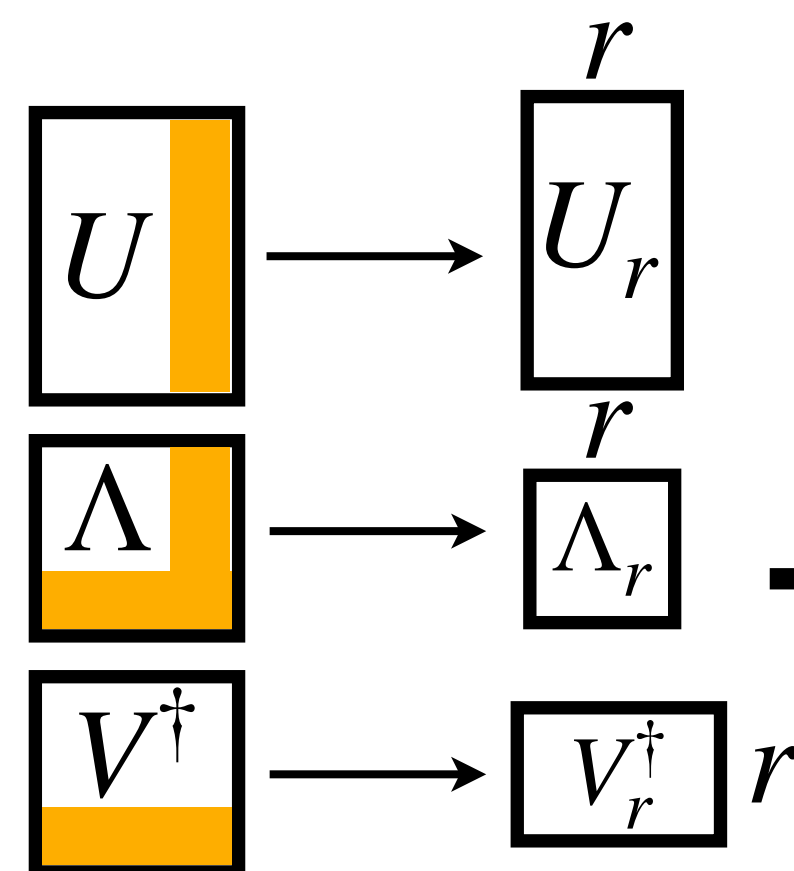
$$UU^\dagger = P, U^\dagger U = I$$

$$V^\dagger V = VV^\dagger = I$$

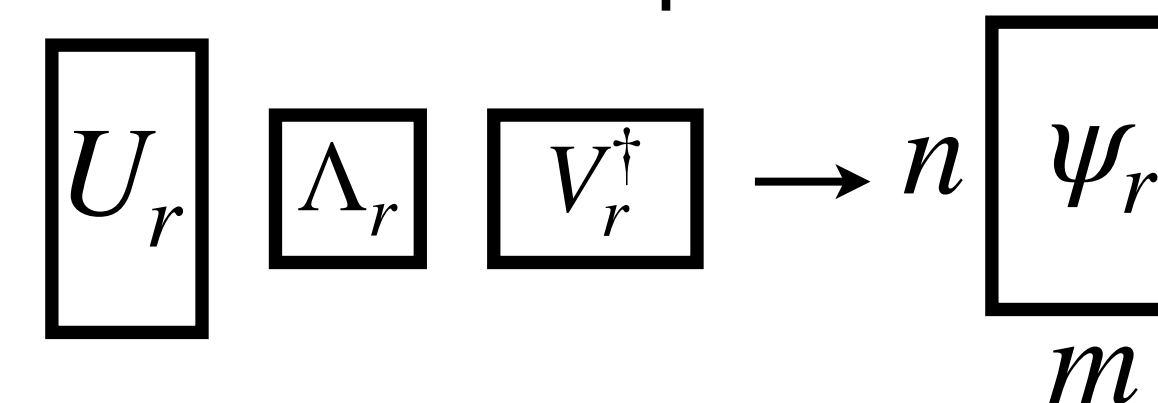
1. Сингулярное разложение



2. Усечение матриц

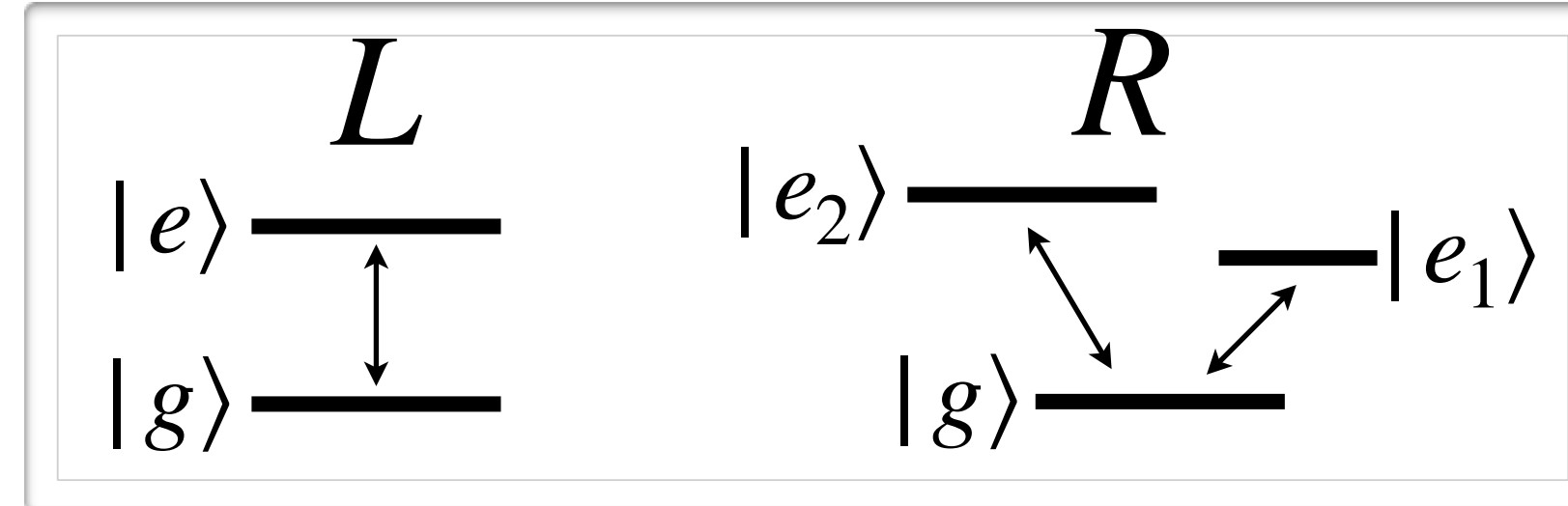


3. Расчет матрицы меньшего ранга





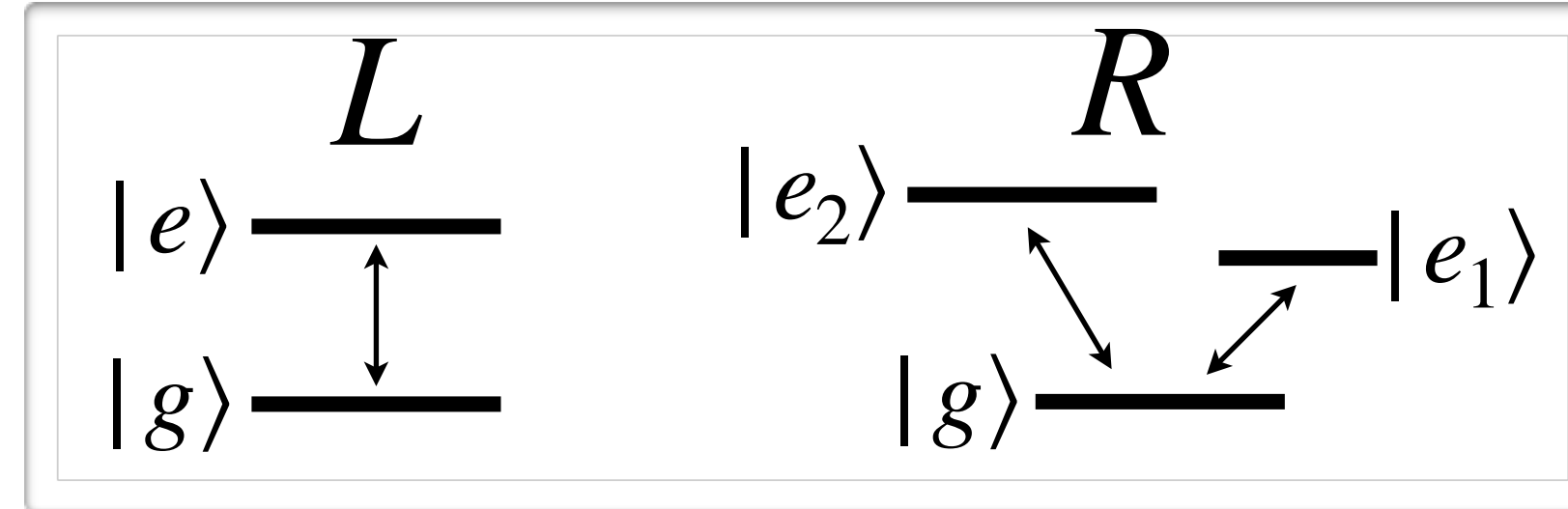
# Достаточный ранг вектора состояния двусоставной системы





## Достаточный ранг вектора состояния двусоставной системы

$$\rho_{ij}^L = \sum_k \psi_{ik} \psi_{jk}^* = \sum_k U_{ik} \Lambda_k^2 U_{kj}^\dagger$$

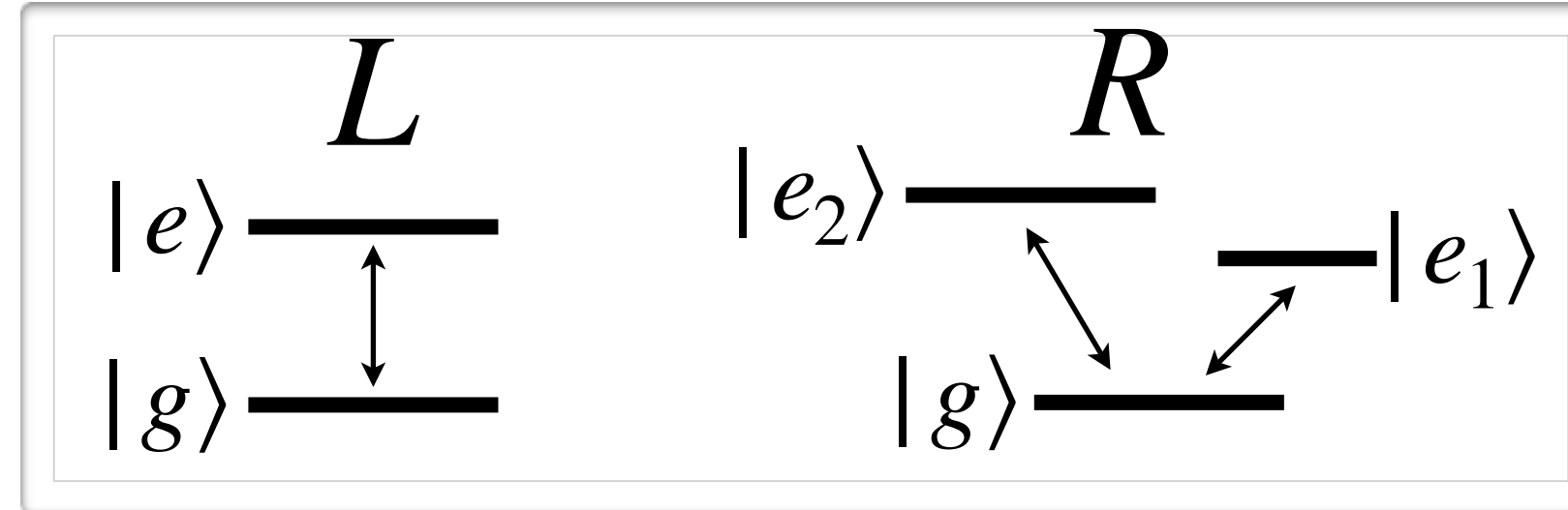






## Достаточный ранг вектора состояния двусоставной системы

$$\rho_{ij}^L = \sum_k \psi_{ik} \psi_{jk}^* = \sum_k U_{ik} \Lambda_k^2 U_{kj}^\dagger$$

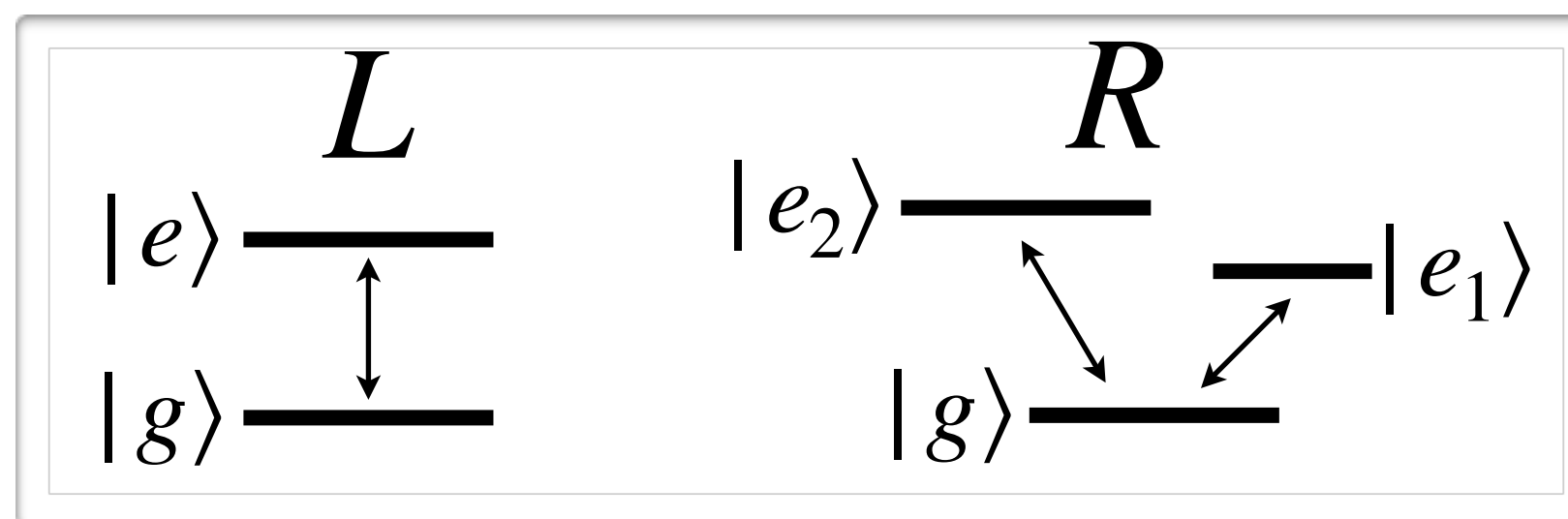


$$\rho_{ij}^R = \sum_k \psi_{ki} \psi_{kj}^* = \sum_k V_{ik}^* \Lambda_k^2 V_{kj}^T$$



## Достаточный ранг вектора состояния двусоставной системы

$$\rho_{ij}^L = \sum_k \psi_{ik} \psi_{jk}^* = \sum_k U_{ik} \Lambda_k^2 U_{kj}^\dagger$$



$$\rho_{ij}^R = \sum_k \psi_{ki} \psi_{kj}^* = \sum_k V_{ik}^* \Lambda_k^2 V_{kj}^T$$

$$S = -\text{Tr} \rho^L \log \rho^L = -\text{Tr} \rho^R \log \rho^R = -\sum_k \Lambda_k^2 \log \Lambda_k^2$$

$$\text{rank} \psi \leq r \Rightarrow \text{rank} \rho^L = \text{rank} \rho^R \leq r \Rightarrow S \leq \log r$$

Состояние системы с энтропией  
перепутанности  $S$  с хорошей точностью  
приближается состоянием с рангом  $r$

$$r \approx \exp(S)$$



# Тензорные сети и тензорные диаграммы

Перемножение матрицы на вектор

$$c_i = \sum_j B_{ij} a_j = \begin{array}{c} i \\ \text{---} \end{array} \textcircled{B} \begin{array}{c} j \\ \text{---} \end{array} \textcircled{a}$$

След матрицы

$$c = \sum_i B_{ii} = \begin{array}{c} i \\ \text{---} \end{array} \textcircled{B} \begin{array}{c} i \\ \text{---} \end{array}$$

Частичный след тензора

$$C_{jk} = \sum_i B_{iijk} = \begin{array}{c} i \\ \text{---} \end{array} \textcircled{B} \begin{array}{c} j \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array}$$

Перемножение двух матриц

$$C_{ik} = \sum_j A_{ij} B_{jk} = \begin{array}{c} i \\ \text{---} \end{array} \textcircled{A} \begin{array}{c} j \\ \text{---} \end{array} \textcircled{B} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array}$$

Свертка двух тензоров

$$C_{jl} = \sum_i A_{ijk} B_{lki} = \begin{array}{c} \text{---} \end{array} \textcircled{A} \begin{array}{c} j \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} k \\ \text{---} \end{array} \textcircled{B} \begin{array}{c} l \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} i \\ \text{---} \end{array}$$

Тензорное произведение матриц

$$C_{ijkl} = B_{ij} \otimes A_{kl} = \begin{array}{c} \text{---} \end{array} \textcircled{B} \begin{array}{c} j \\ \text{---} \end{array} \otimes \begin{array}{c} \text{---} \end{array} \textcircled{A} \begin{array}{c} l \\ \text{---} \end{array}$$



## Состояние произведения матриц (Matrix product state)

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \psi_{i_1, i_2, \dots, i_n} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle$$



## Состояние произведения матриц (Matrix product state)

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \psi_{i_1, i_2, \dots, i_n} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle$$

$d^n$  коэффициентов



## Состояние произведения матриц (Matrix product state)

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \psi_{i_1, i_2, \dots, i_n} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle$$

$d^n$  коэффициентов

$SVD$

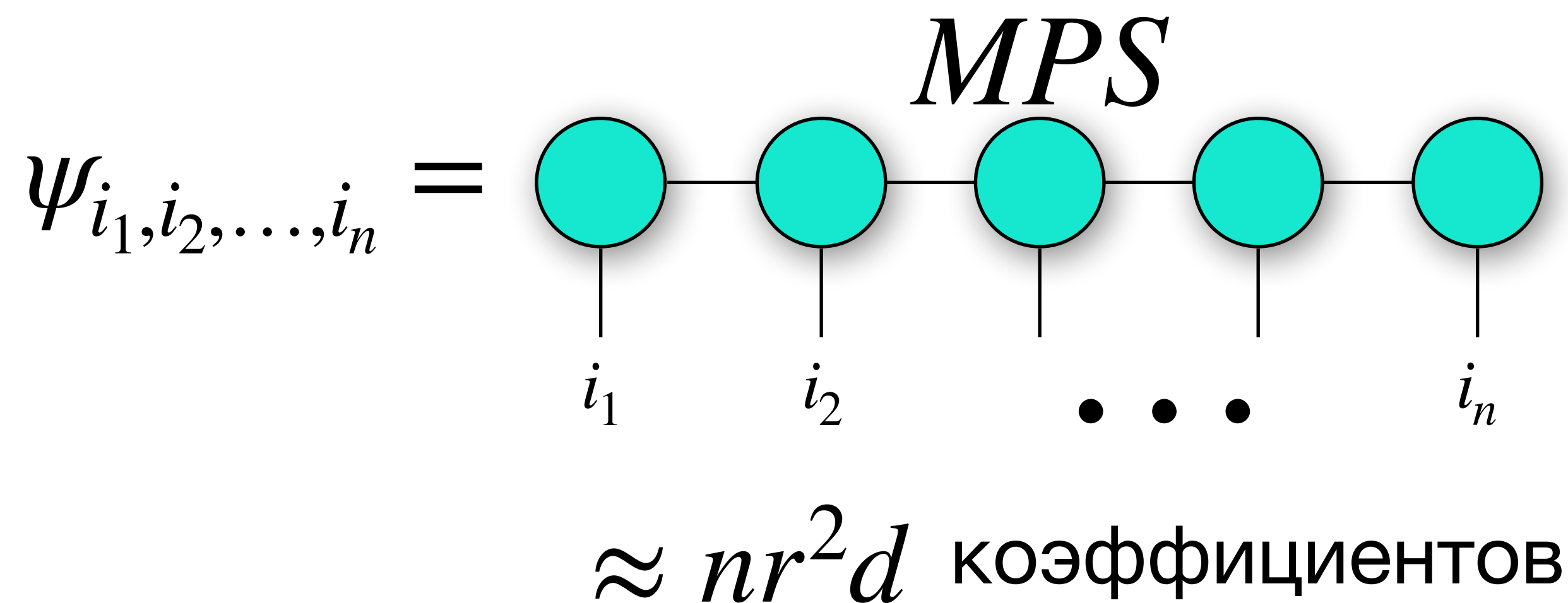
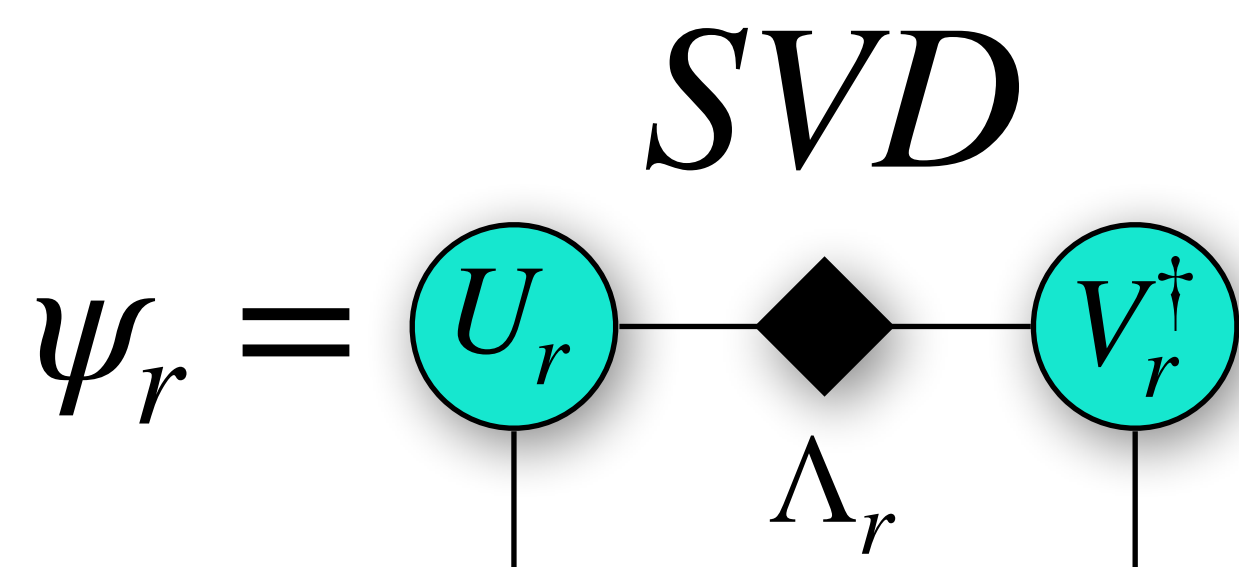
$$\psi_r = U_r \Lambda_r V_r^\dagger$$



## Состояние произведения матриц (Matrix product state)

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \psi_{i_1, i_2, \dots, i_n} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle$$

$d^n$  коэффициентов

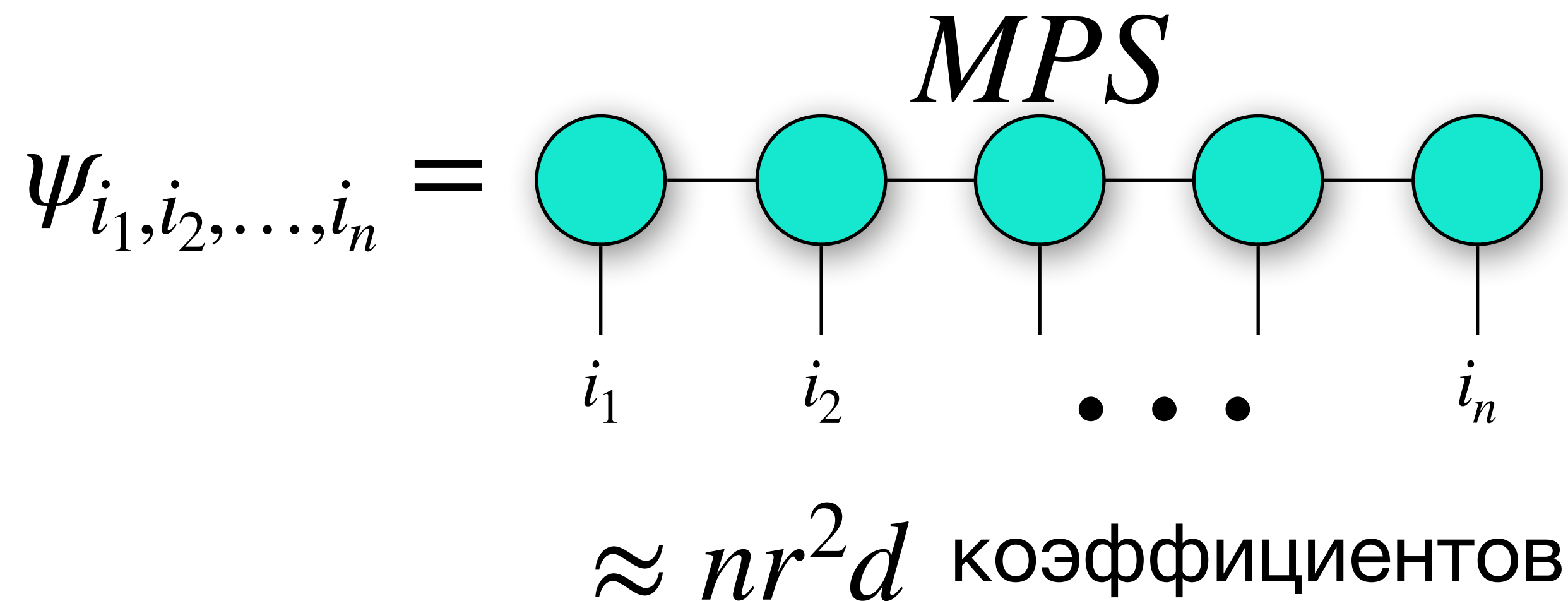
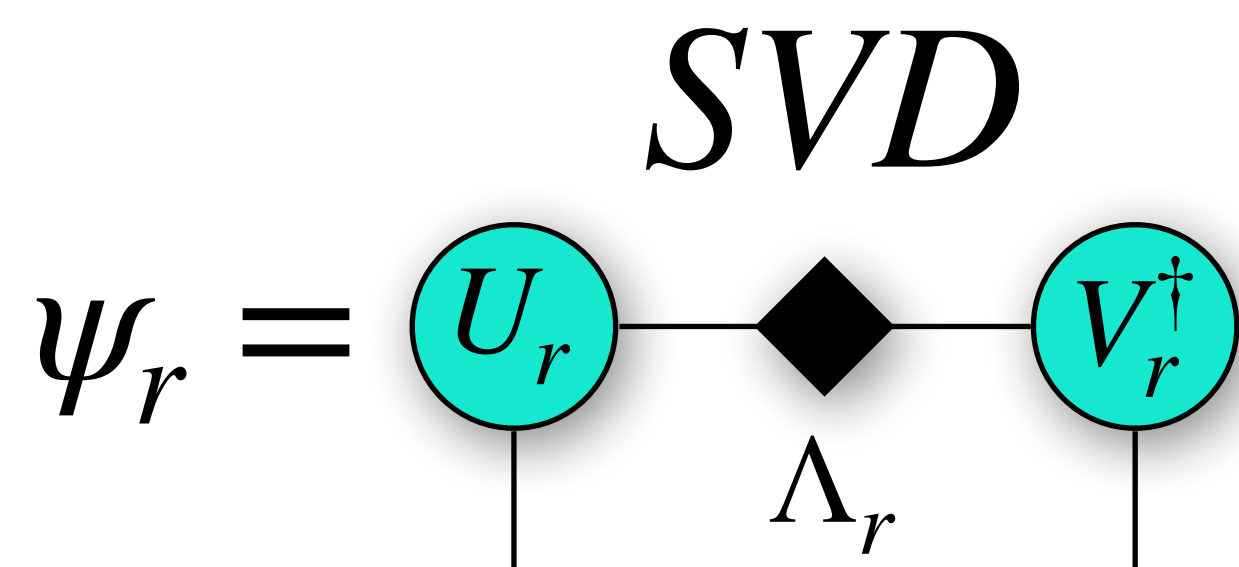






## Состояние произведения матриц (Matrix product state)

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \psi_{i_1, i_2, \dots, i_n} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle \quad d^n \text{ коэффициентов}$$



$$r \approx \exp(S)$$



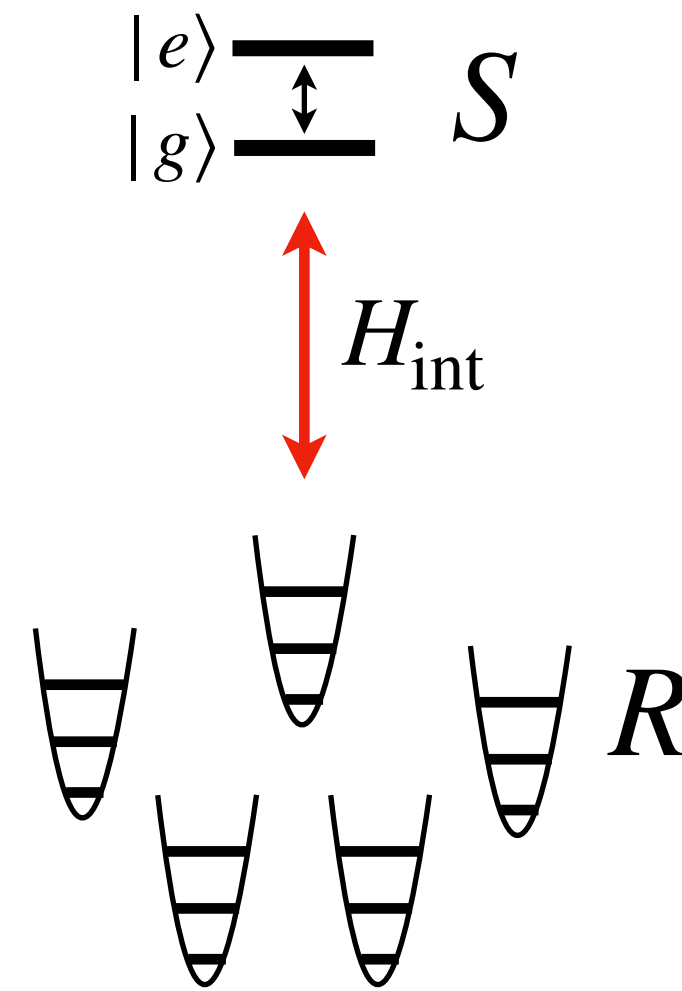


# Открытые квантовые системы

$$\rho_S(t) = \Phi_t \rho_S(0) = \text{Tr}_R [U_t \rho_S(0) \otimes \rho_R U_t^\dagger]$$

$$U_t = \exp(-iHt)$$

$$H = H_S \otimes I + I \otimes H_R + \gamma \sum_i A_i \otimes B_i$$



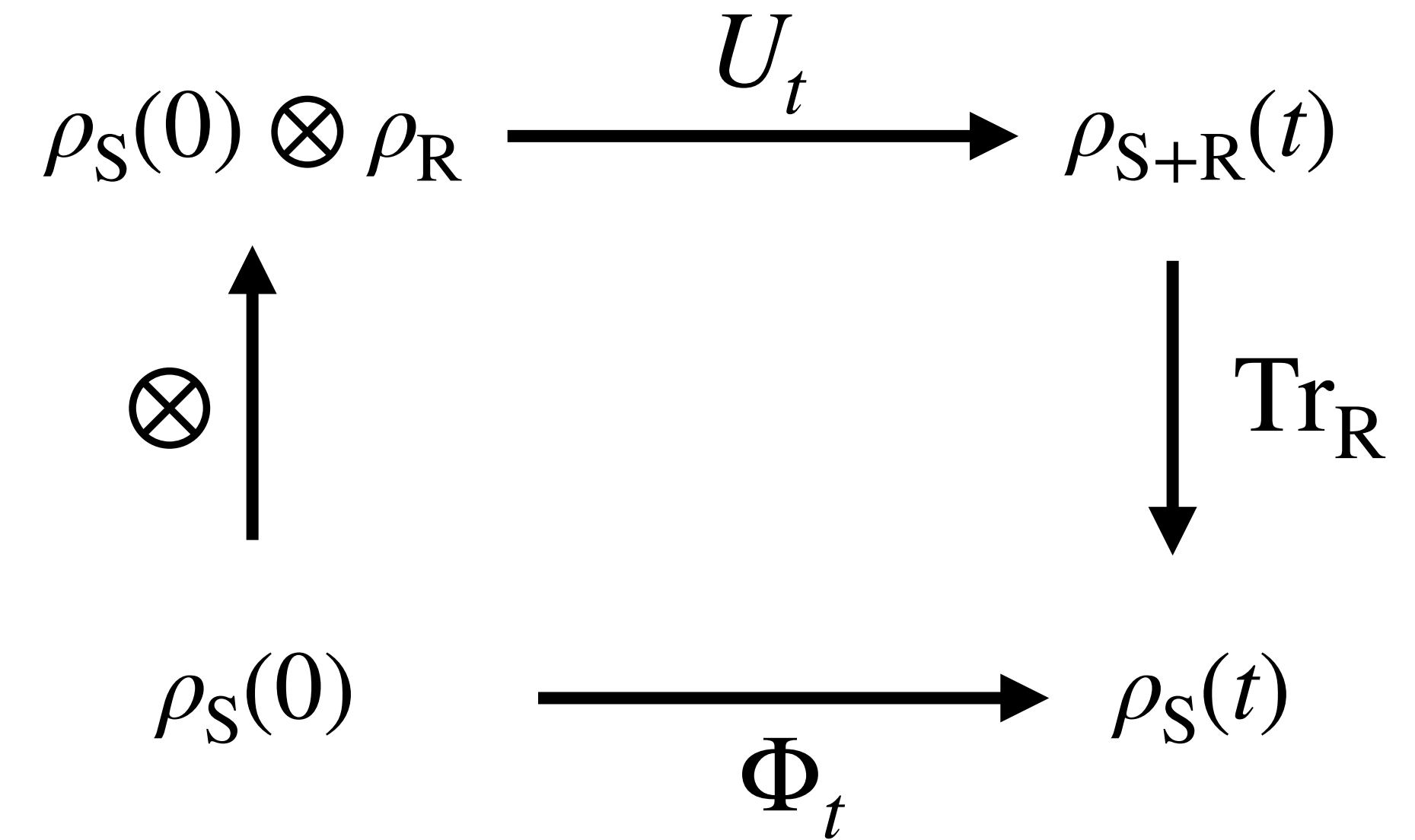
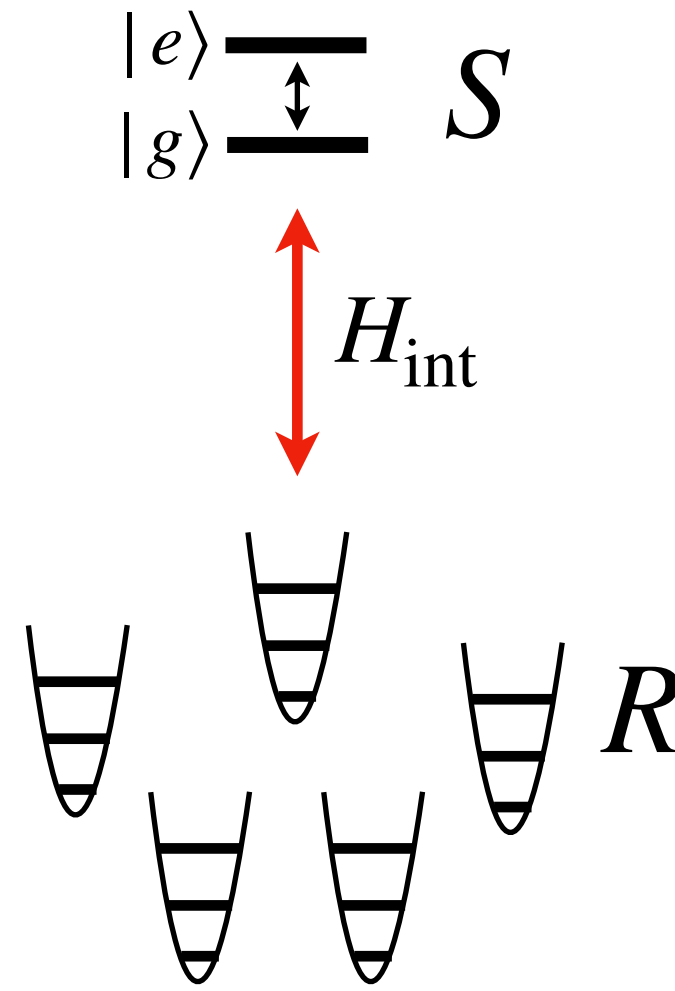


# Открытые квантовые системы

$$\rho_S(t) = \Phi_t \rho_S(0) = \text{Tr}_R [U_t \rho_S(0) \otimes \rho_R U_t^\dagger]$$

$$U_t = \exp(-iHt)$$

$$H = H_S \otimes I + I \otimes H_R + \gamma \sum_i A_i \otimes B_i$$



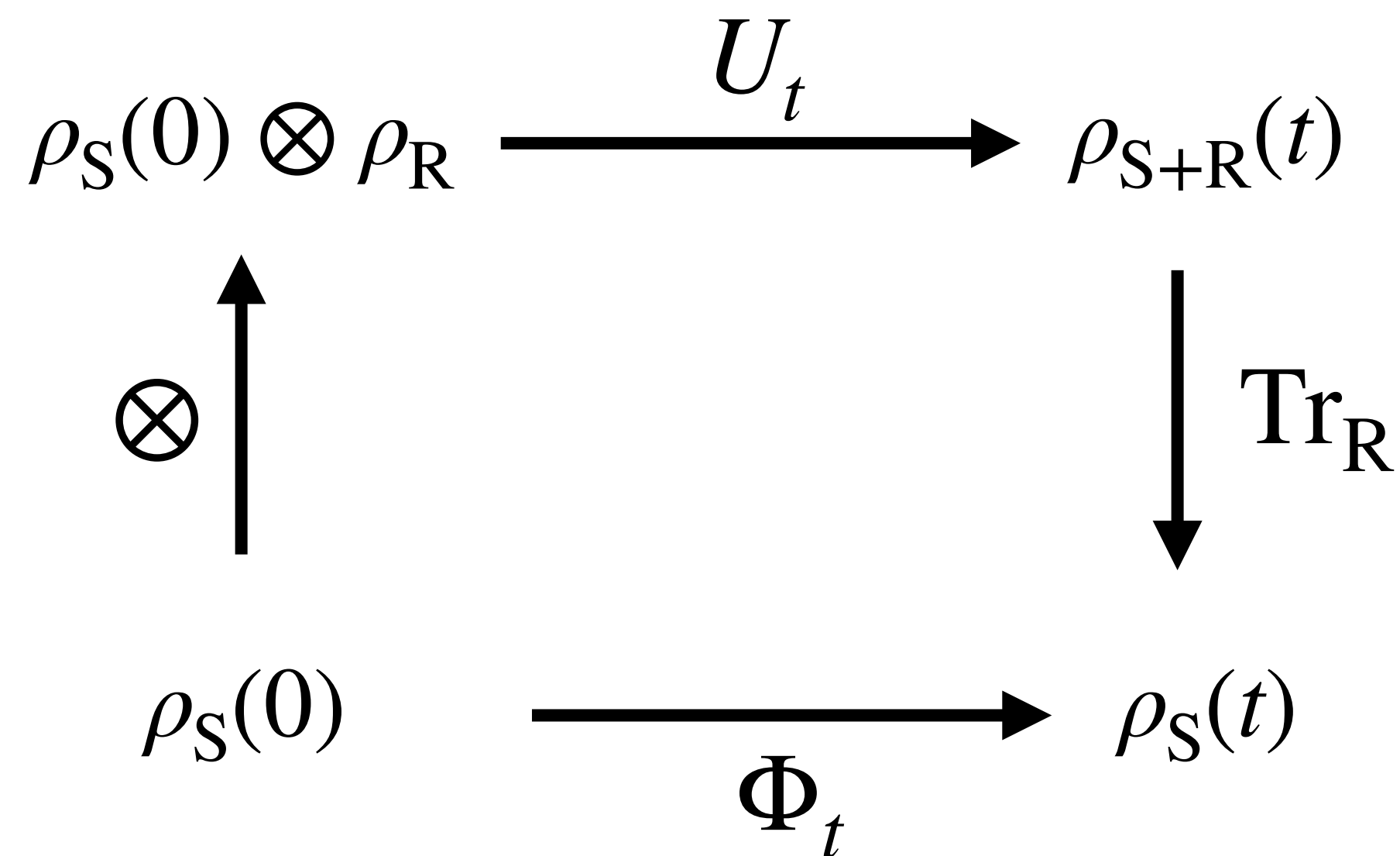
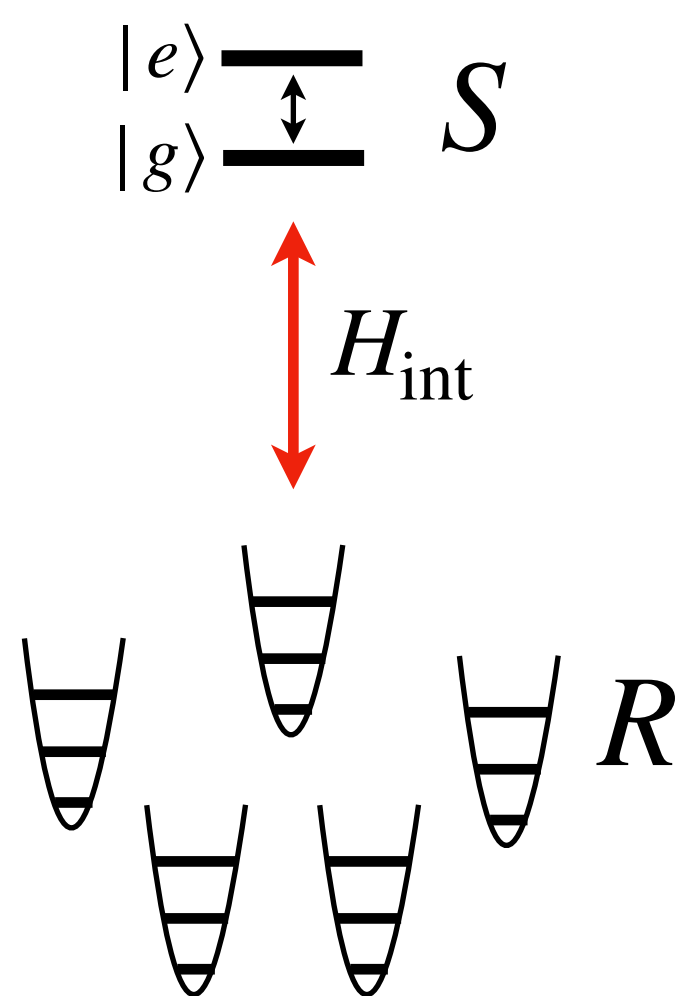


# Открытые квантовые системы

$$\rho_S(t) = \Phi_t \rho_S(0) = \text{Tr}_R [U_t \rho_S(0) \otimes \rho_R U_t^\dagger]$$

$$U_t = \exp(-iHt)$$

$$H = H_S \otimes I + I \otimes H_R + \gamma \sum_i A_i \otimes B_i$$



## Приближение Маркова

$$\Phi_t = \Phi_{t-\tau} \Phi_\tau$$

$$\Phi_t = \exp(t\mathcal{L})$$

$$\frac{d\rho}{dt} = \mathcal{L}\rho = \frac{1}{i} [H, \rho] + \sum_{n,m} \Gamma_{nm} \left( F_n \rho F_m^\dagger - \frac{1}{2} \{F_m^\dagger F_n, \rho\} \right)$$

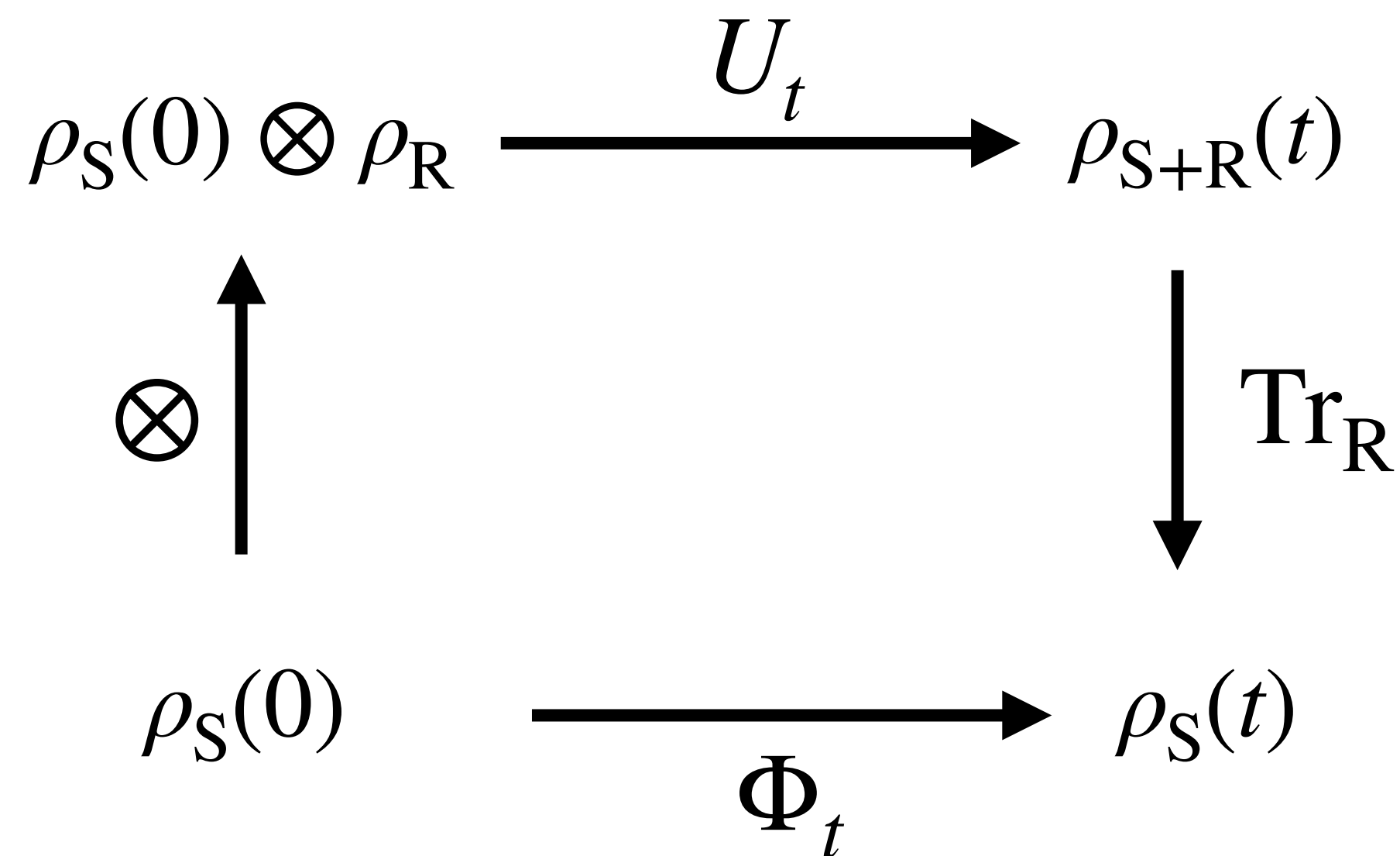
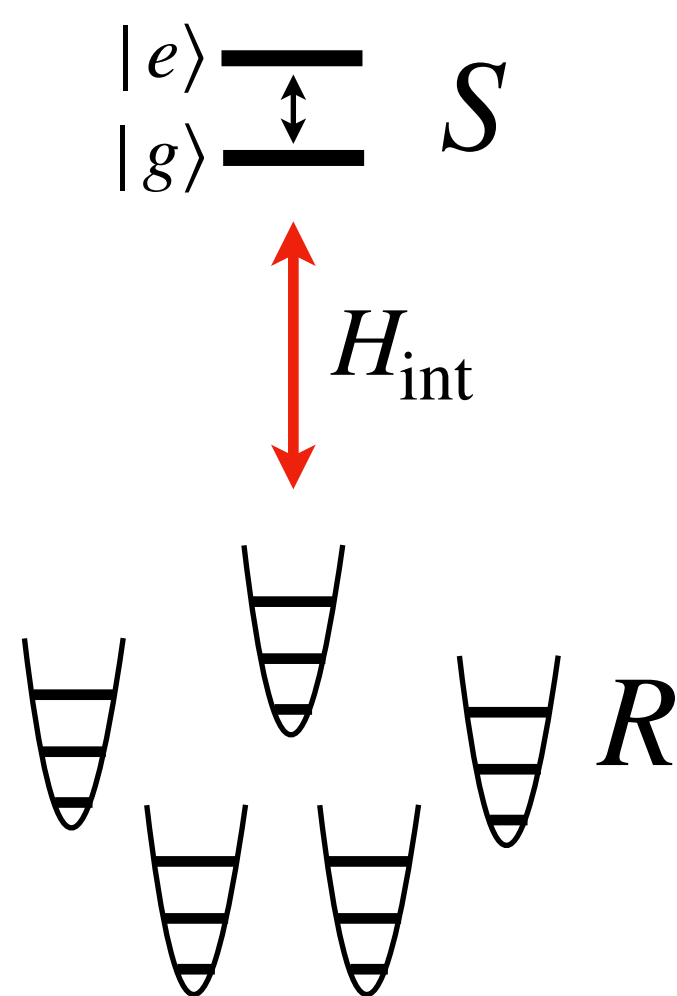


# Открытые квантовые системы

$$\rho_S(t) = \Phi_t \rho_S(0) = \text{Tr}_R [U_t \rho_S(0) \otimes \rho_R U_t^\dagger]$$

$$U_t = \exp(-iHt)$$

$$H = H_S \otimes I + I \otimes H_R + \gamma \sum_i A_i \otimes B_i$$



## Приближение Маркова

$$\Phi_t = \Phi_{t-\tau} \Phi_\tau$$

$$\Phi_t = \exp(t\mathcal{L})$$

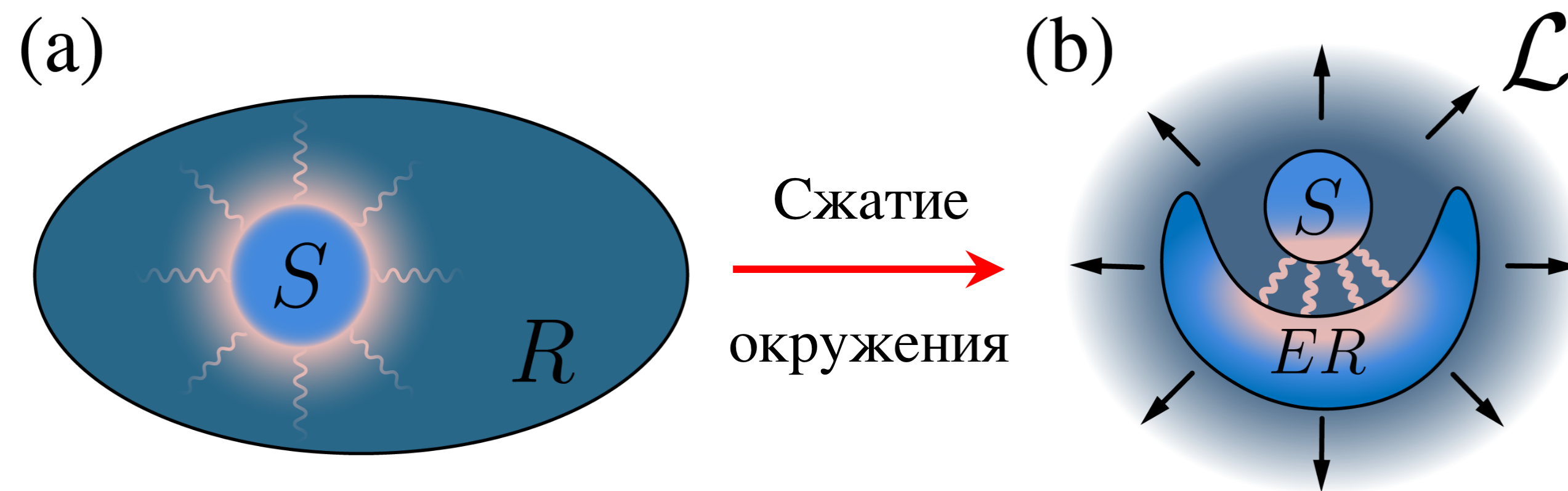
$$\frac{d\rho}{dt} = \mathcal{L}\rho = \frac{1}{i} [H, \rho] + \sum_{n,m} \Gamma_{nm} \left( F_n \rho F_m^\dagger - \frac{1}{2} \{F_m^\dagger F_n, \rho\} \right)$$

## Динамика с памятью

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \int_{t_0}^t \mathcal{K}(t, \tau) [\rho_S(\tau)] d\tau$$

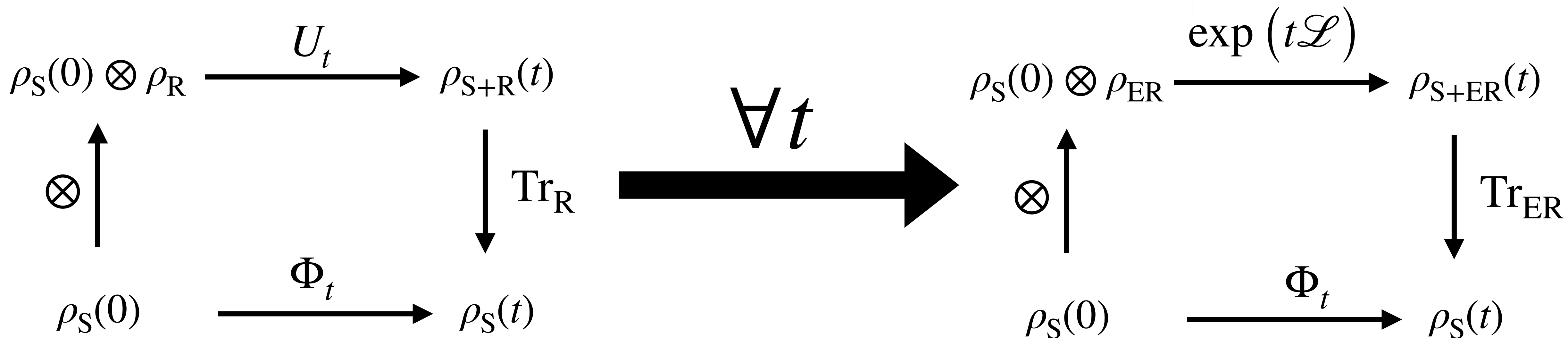
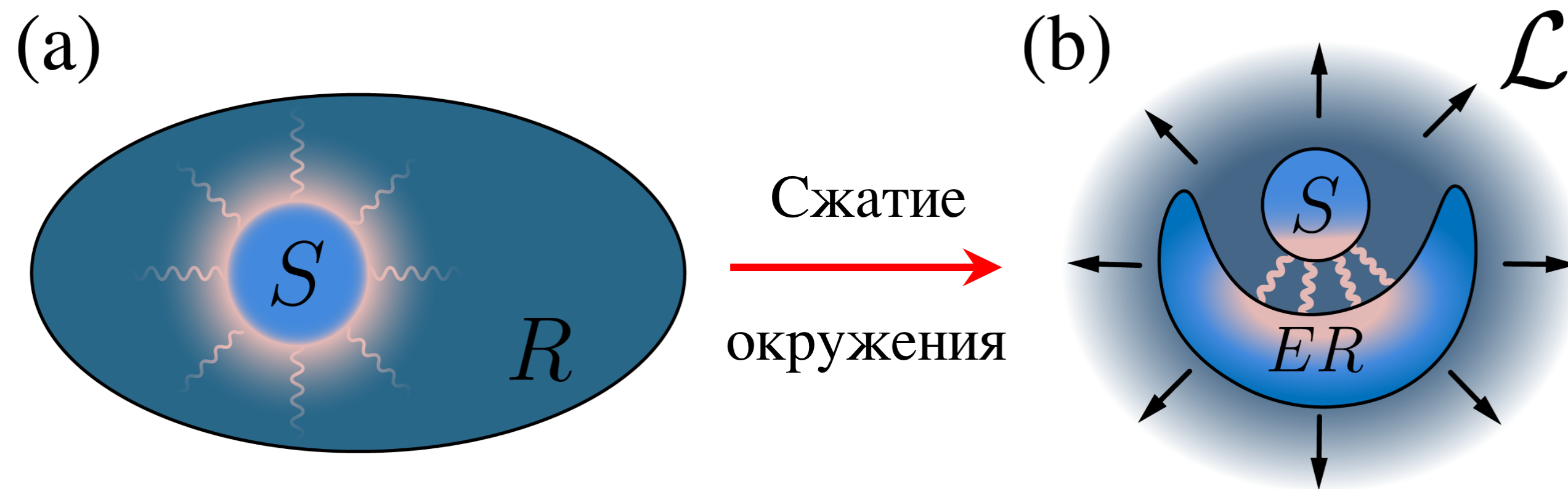


# Сжатие окружения квантовой системы



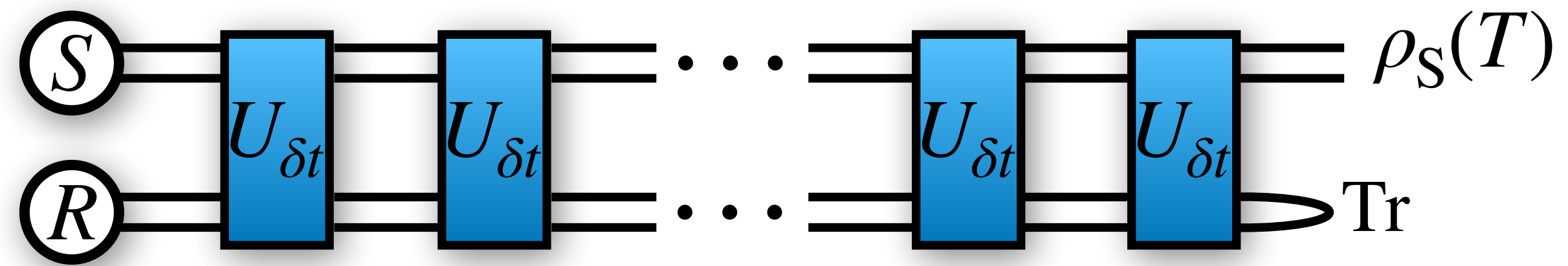


# Сжатие окружения квантовой системы





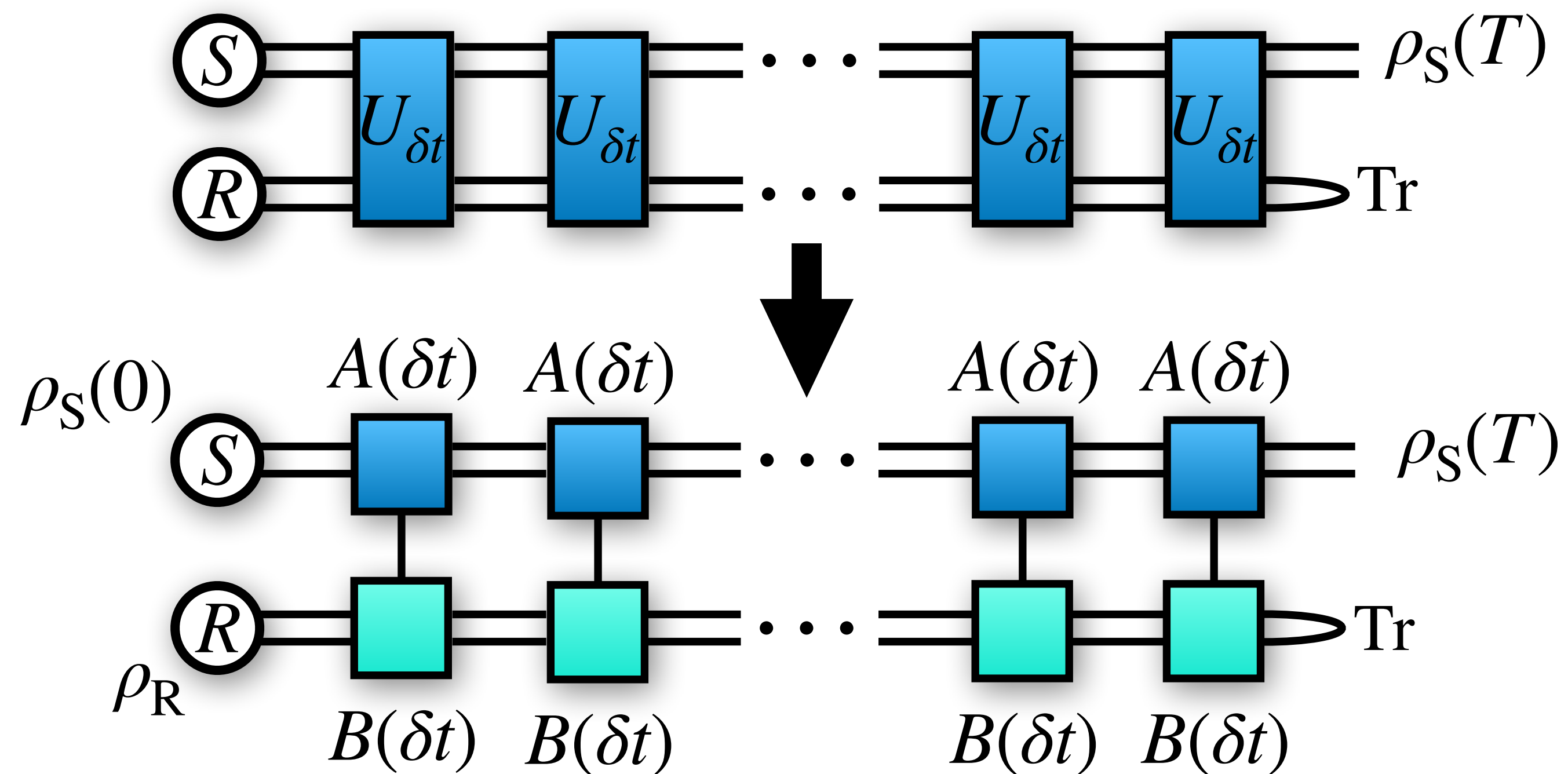
# Язык тензорных сетей для открытых квантовых систем







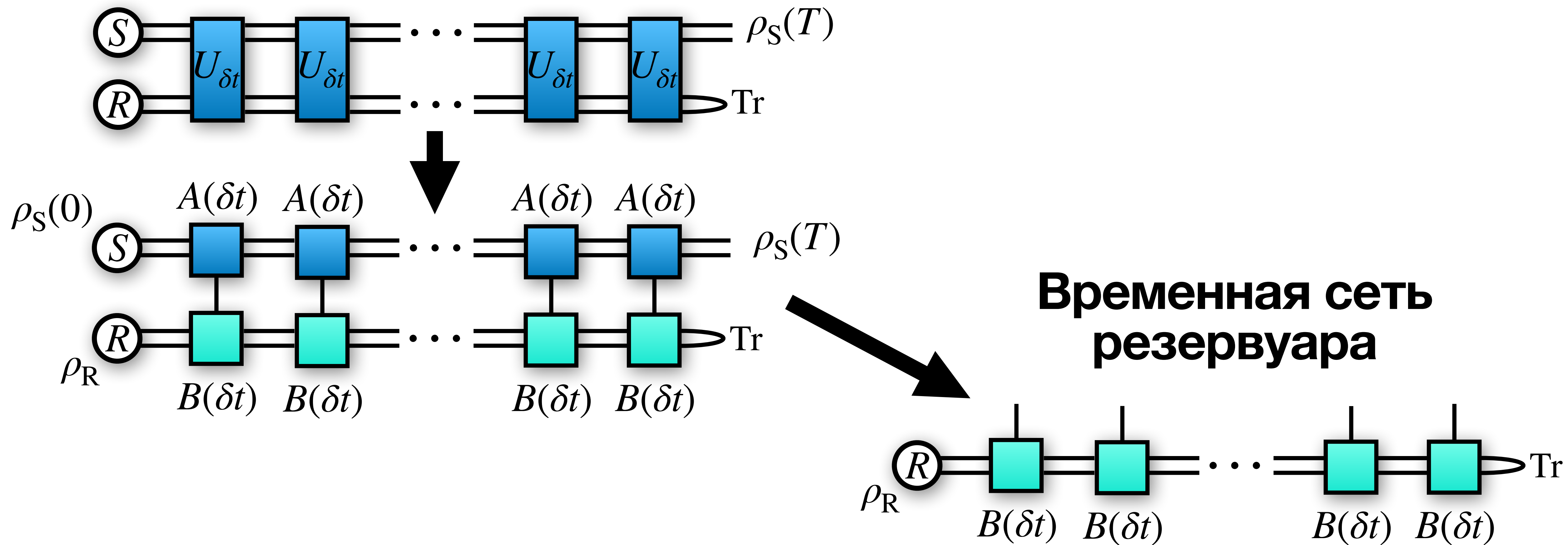
# Язык тензорных сетей для открытых квантовых систем







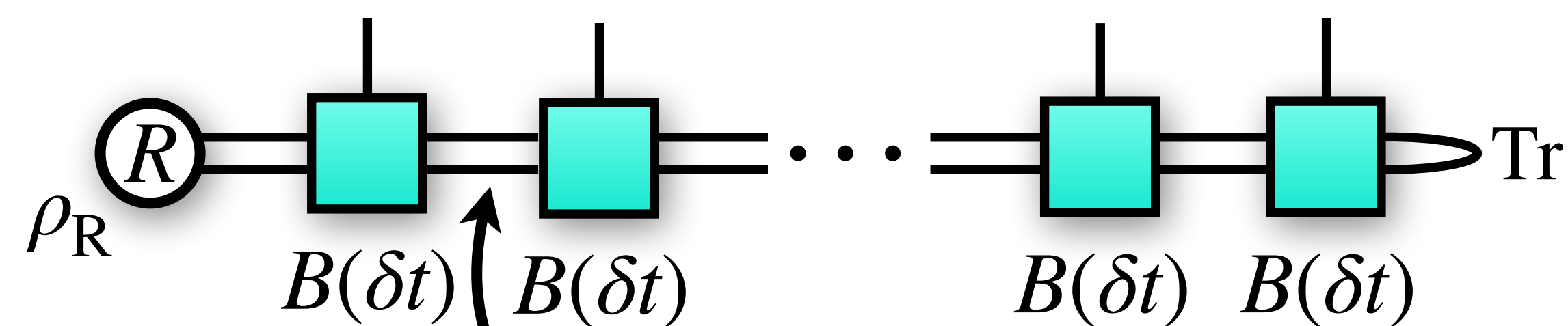
# Язык тензорных сетей для открытых квантовых систем





## Понижение размерности окружения

Временная сеть резервуара  
имеет форму MPS



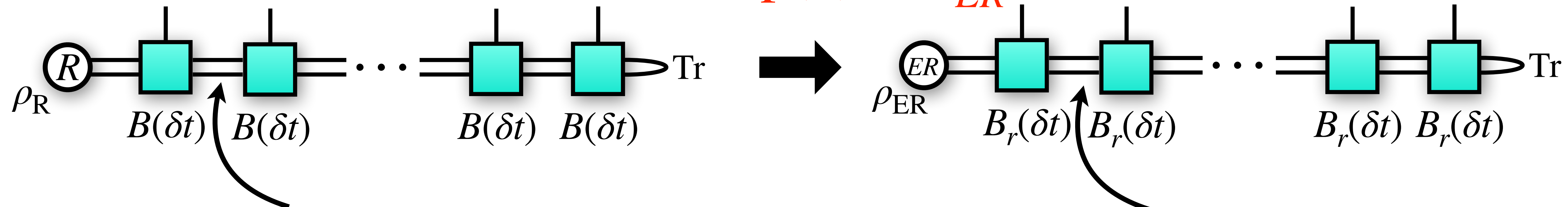
Квадрат размерности  
реального окружения  
это ранг MPS



# Понижение размерности окружения

Временная сеть резервуара  
имеет форму MPS

$$r \approx \exp(S) \approx d_{ER}^2$$



Квадрат размерности  
реального окружения  
это ранг MPS

Квадрат размерности  
эффективного  
окружения это ранг  
MPS



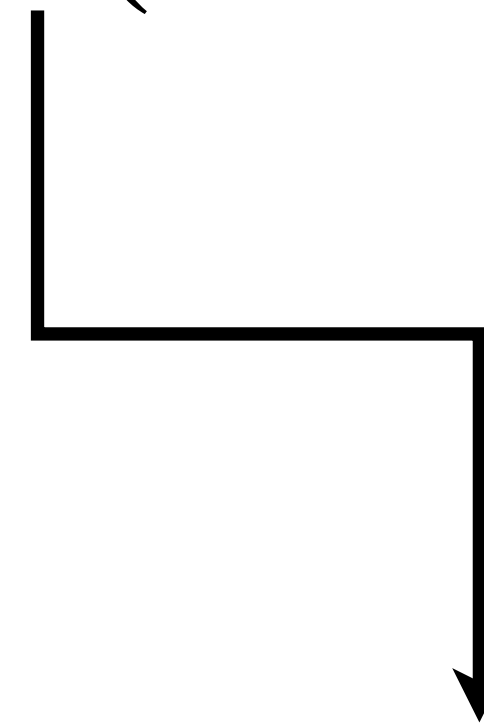
## Оценка достаточной размерности эффективного окружения

$$d_{\text{ER}} = \exp(2n\gamma T(1 - \log \gamma\tau))$$



## Оценка достаточной размерности эффективного окружения

$$d_{\text{ER}} = \exp(2n\gamma T(1 - \log \gamma\tau))$$



**Глубина памяти**

**Ширина ядра  $\mathcal{K}$  в уравнении**

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \int_{t_0}^t \mathcal{K}(t, \tau) [\rho_S(\tau)] d\tau$$



## Оценка достаточной размерности эффективного окружения

$$d_{\text{ER}} = \exp(2n\gamma T(1 - \log \gamma\tau))$$

$\tau = \omega^{-1}$   
 $\omega$  максимальная  
частота изменения  
ядра  $\mathcal{K}$

Глубина памяти  
Ширина ядра  $\mathcal{K}$  в уравнении

$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \int_{t_0}^t \mathcal{K}(t, \tau) [\rho_S(\tau)] d\tau$$



## Оценка достаточной размерности эффективного окружения

$$d_{\text{ER}} = \exp(2n\gamma T(1 - \log \gamma\tau))$$

$\tau = \omega^{-1}$   
 $\omega$  максимальная  
частота изменения  
ядра  $\mathcal{K}$

Luchnikov, I. A., Vintskevich, S. V., Ouerdane, H., & Filippov, S. N. (2019). Simulation complexity of open quantum dynamics: Connection with tensor networks. *Physical review letters*, 122(16), 160401.

$$H_{\text{int}} = \gamma \sum_{i=1}^n A_i \otimes B_i$$

Глубина памяти  
Ширина ядра  $\mathcal{K}$  в уравнении

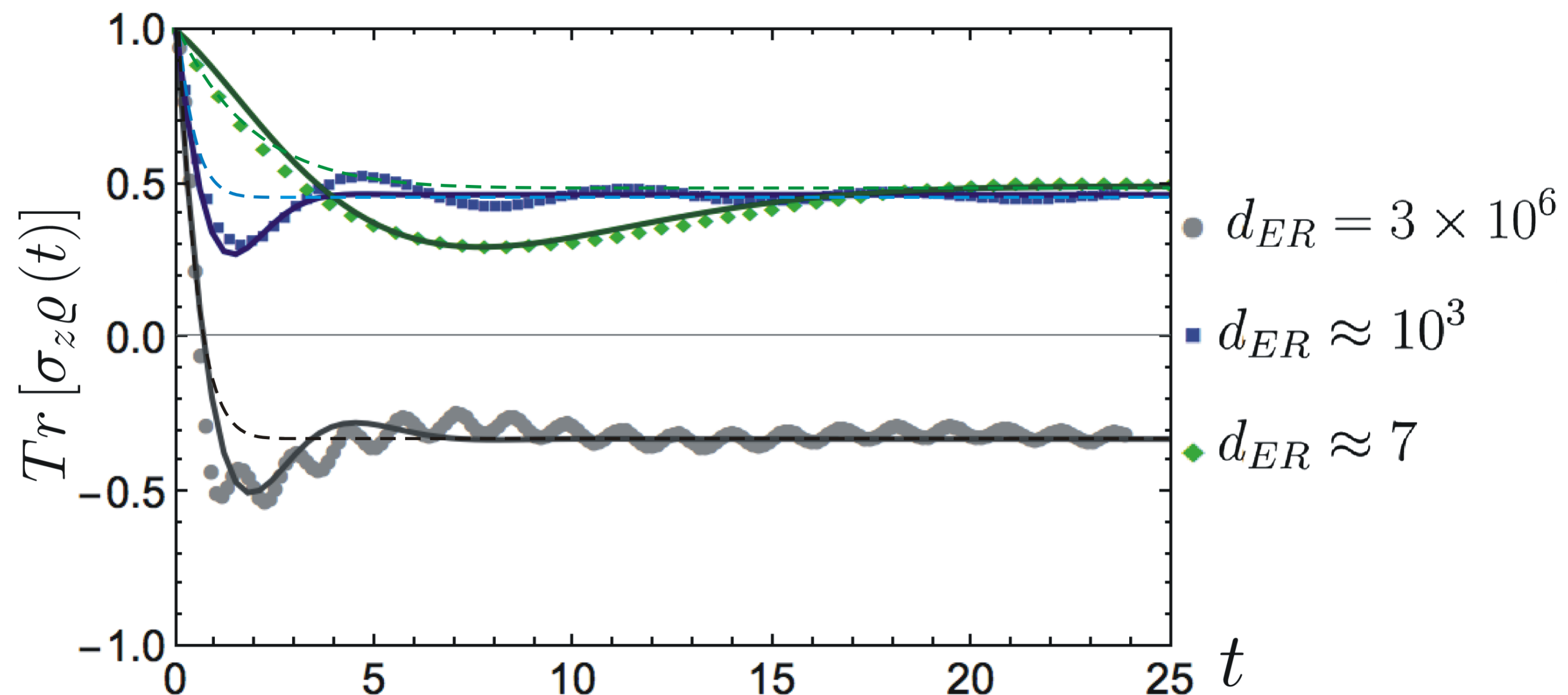
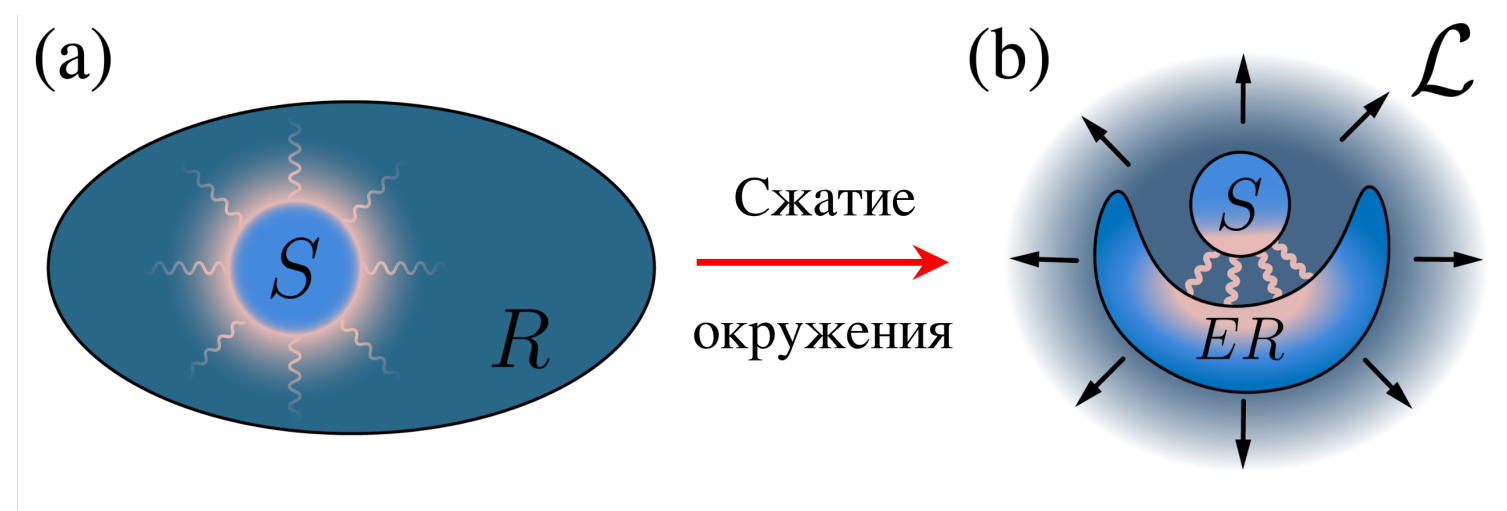
$$\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \int_{t_0}^t \mathcal{K}(t, \tau) [\rho_S(\tau)] d\tau$$





## Пример: распад двухуровневой системы в структурированном окружении

$$H = \frac{\Delta}{2} \sigma_z + \sum_k \Omega_k a_k^\dagger a_k + \sum_k g_k (a_k^\dagger \sigma_- + a_k \sigma_+)$$







## Первое положение, выносимое на защиту

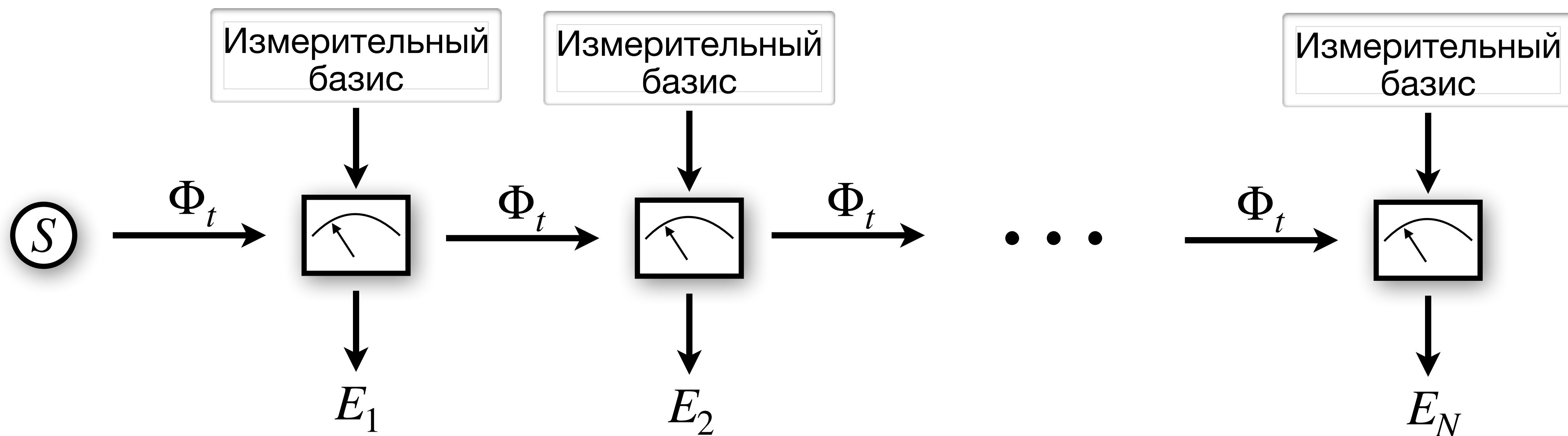
Немарковская динамика открытой квантовой системы допускает марковское вложение с размерностью эффективного окружения

$$d_{\text{ER}} \approx \exp \left( 2n\gamma T \left[ 1 - \log(\gamma\tau) \right] \right),$$

где  $T$  — характерное время убывания корреляционных функций окружения,  $n$  — количество различных степеней свободы системы, участвующих во взаимодействии с окружением,  $\tau^{-1}$  — характерная частота изменения корреляционных функций резервуара,  $\gamma$  — константа взаимодействия окружения и системы.



## Восстановление эффективного окружения по экспериментальным данным

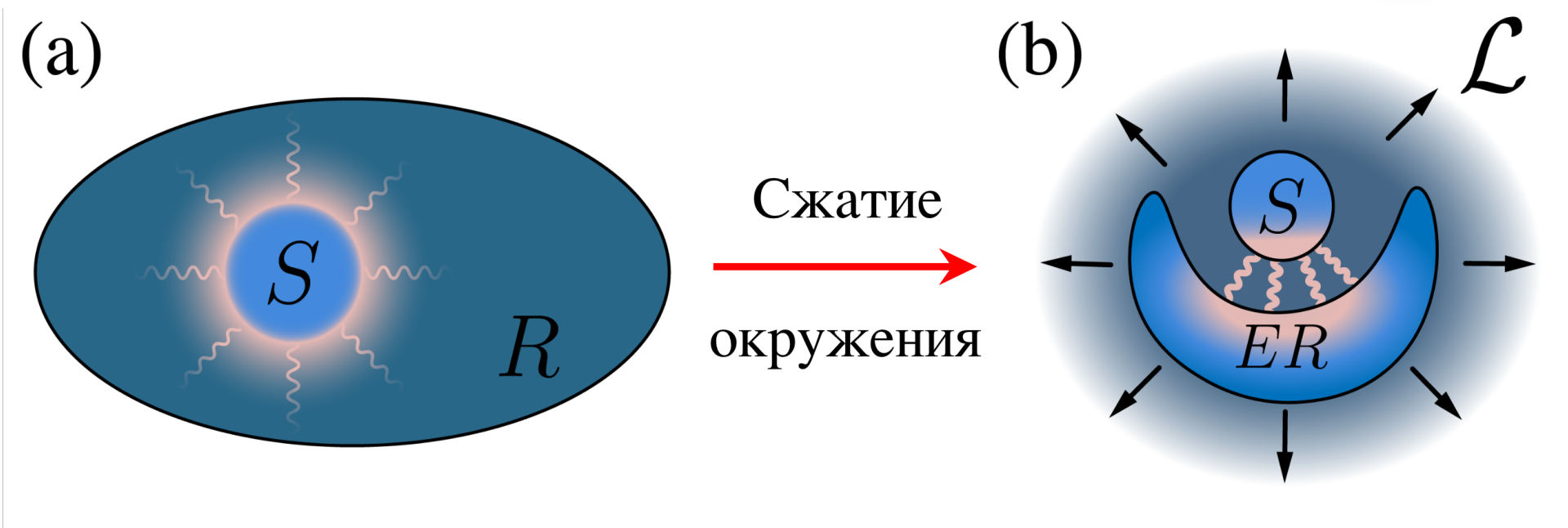
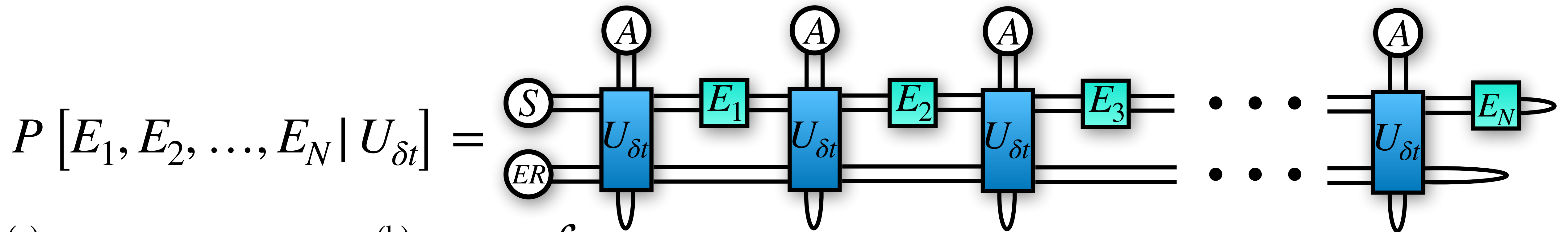


Набор данных для восстановления  
эффективного окружения

$$\{E_i\}_{i=1}^N$$



## Восстановление эффективного окружения по экспериментальным данным



$$\rho_{S+ER}(t + \delta t) = \text{Tr}_A \left( U_{\delta t} \rho_{S+ER}(t) \otimes \rho_A U_{\delta t}^\dagger \right) =$$



## Восстановление эффективного окружения по экспериментальным данным

$$\log P [E_1, E_2, \dots, E_N | U_{\delta t}] \rightarrow \max_{U_{\delta t}}$$

$$U_{\delta t}^{\text{opt}} \rightarrow \Phi_{\delta t} \rightarrow \mathcal{L} = \frac{\log \Phi_{\delta t}}{\delta t}$$

Luchnikov, I. A., Vintskevich, S. V., Grigoriev, D. A., & Filippov, S. N. (2020). Machine learning non-Markovian quantum dynamics. *Physical Review Letters*, 124(14), 140502.



## Расчет градиента логарифмического правдоподобия

$$\frac{\partial \log p(\{E_i\}_{i=1}^n | H)}{\partial H_{ij}} = \frac{1}{p(\{E_i\}_{i=1}^n | H)} \frac{\partial p(\{E_i\}_{i=1}^n | H)}{\partial H_{ij}}$$

$$\frac{\partial p(\{E_i\}_{i=1}^n | H)}{\partial H_{ij}} = \sum_{m=1}^n \text{Tr} \left\{ (E_m \mathcal{E}_{S+ER}(t_m) E_m) \otimes I_A \left[ \frac{\partial U(H)}{\partial H_{ij}} \tilde{Q}_{S+ER}(t_{m-1}) \otimes \rho_A U^\dagger(H) + U(H) \tilde{Q}_{S+ER}(t_{m-1}) \otimes \rho_A \frac{\partial U^\dagger(H)}{\partial H_{ij}} \right] \right\}$$

$$\frac{\partial U(H)}{\partial H_{ij}} = \left( \frac{\partial U^\dagger(H)}{\partial H_{ij}} \right)^\dagger = \sum_{k,l} f_{kl} \langle \psi_k | i \rangle \langle j | \psi_l \rangle | \psi_k \rangle \langle \psi_l |$$

$$f_{kl} = \begin{cases} \frac{e^{-i\lambda_k} - e^{-i\lambda_l}}{\lambda_k - \lambda_l}, & \lambda_k \neq \lambda_l, \\ e^{-i\lambda_l}, & \lambda_k = \lambda_l \end{cases}$$

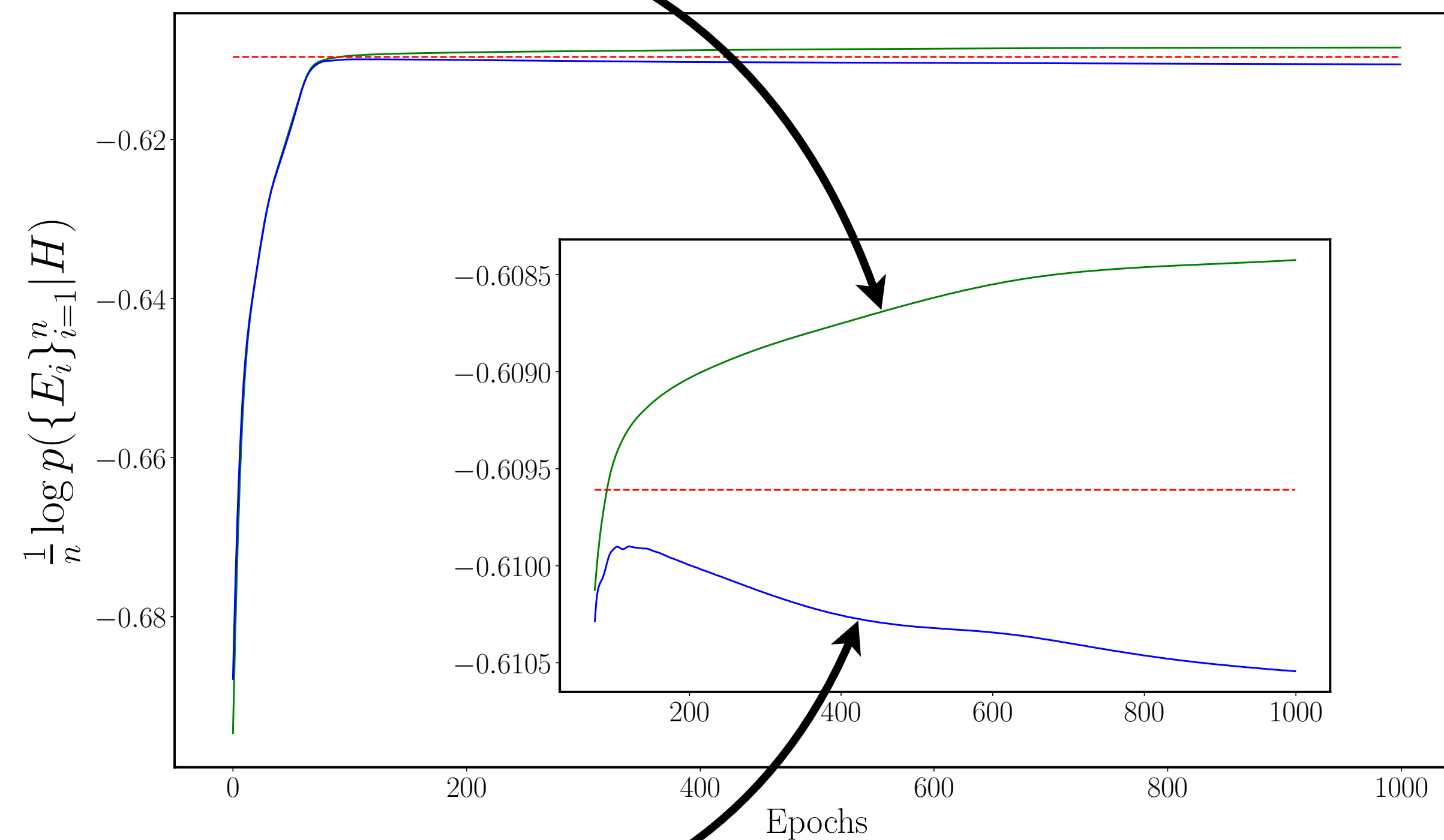
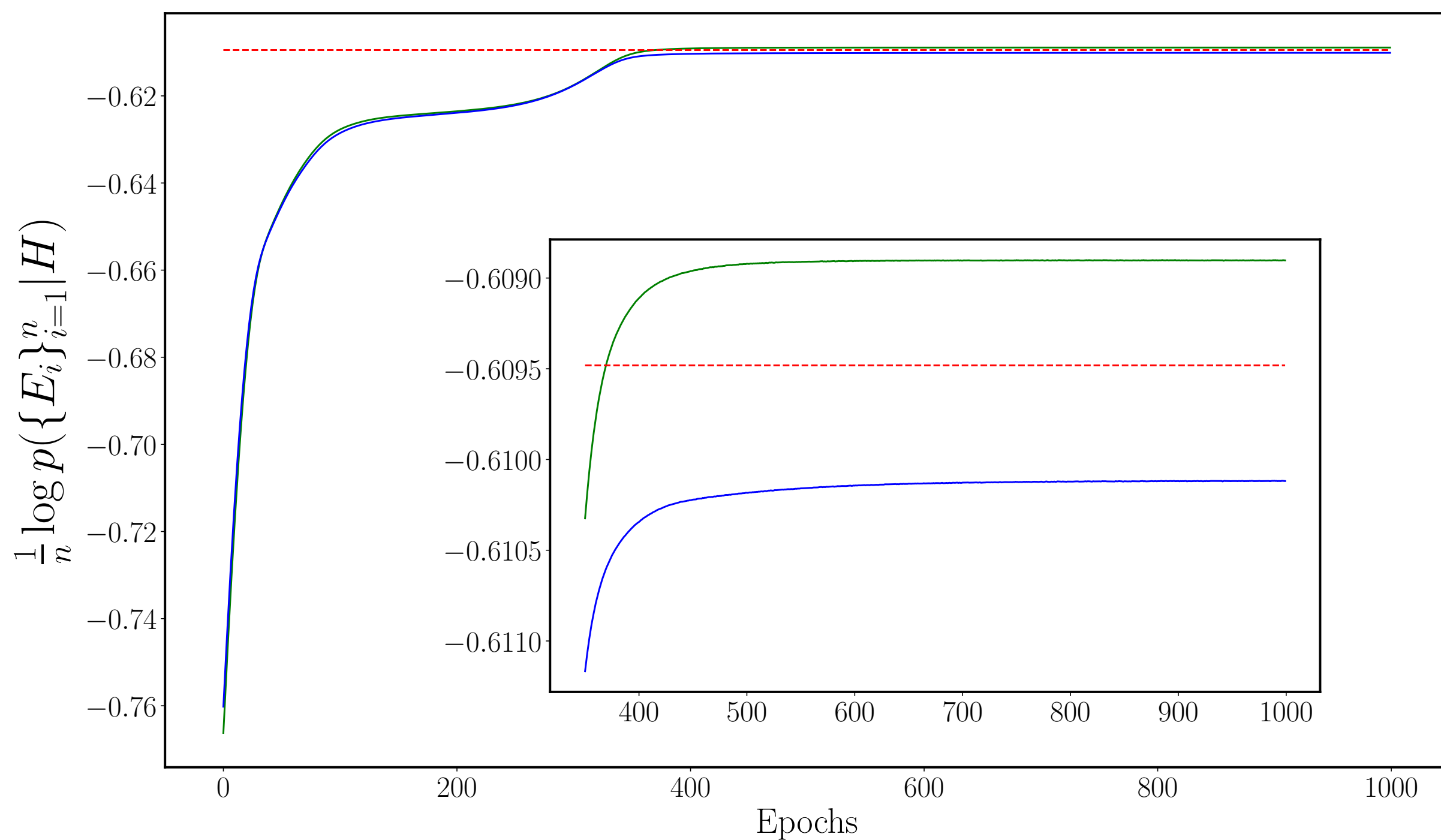


# Кривые обучения

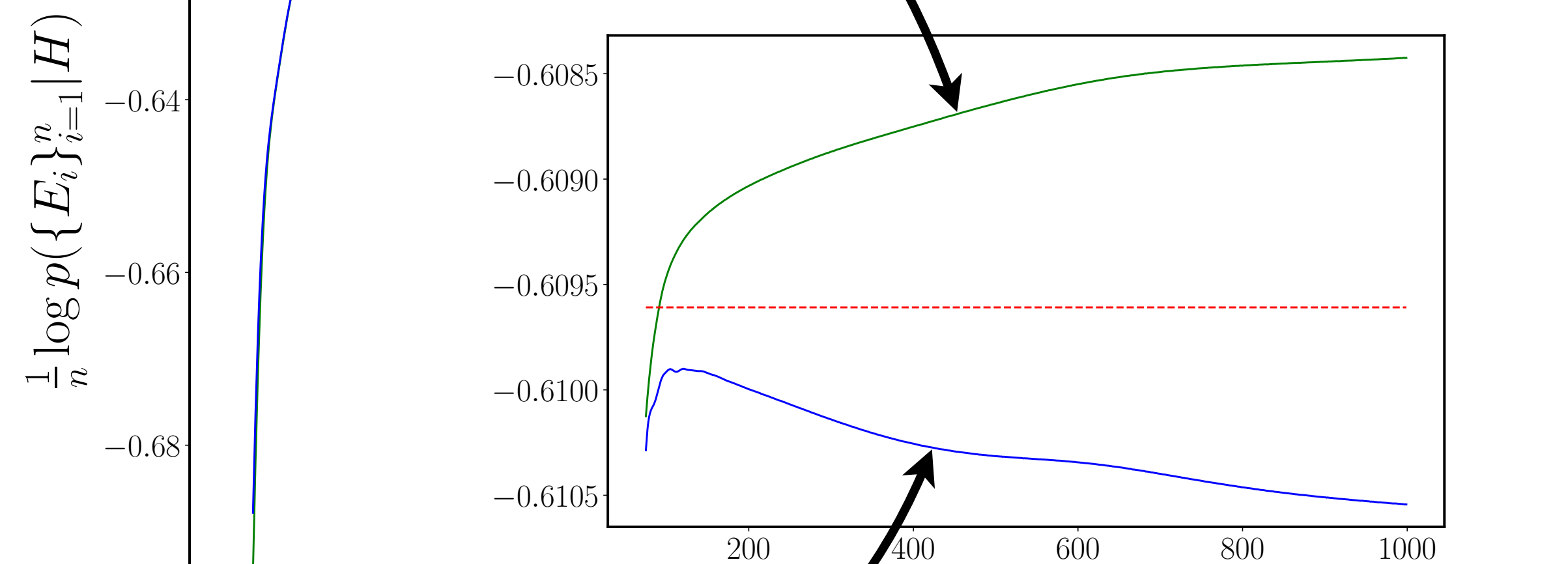
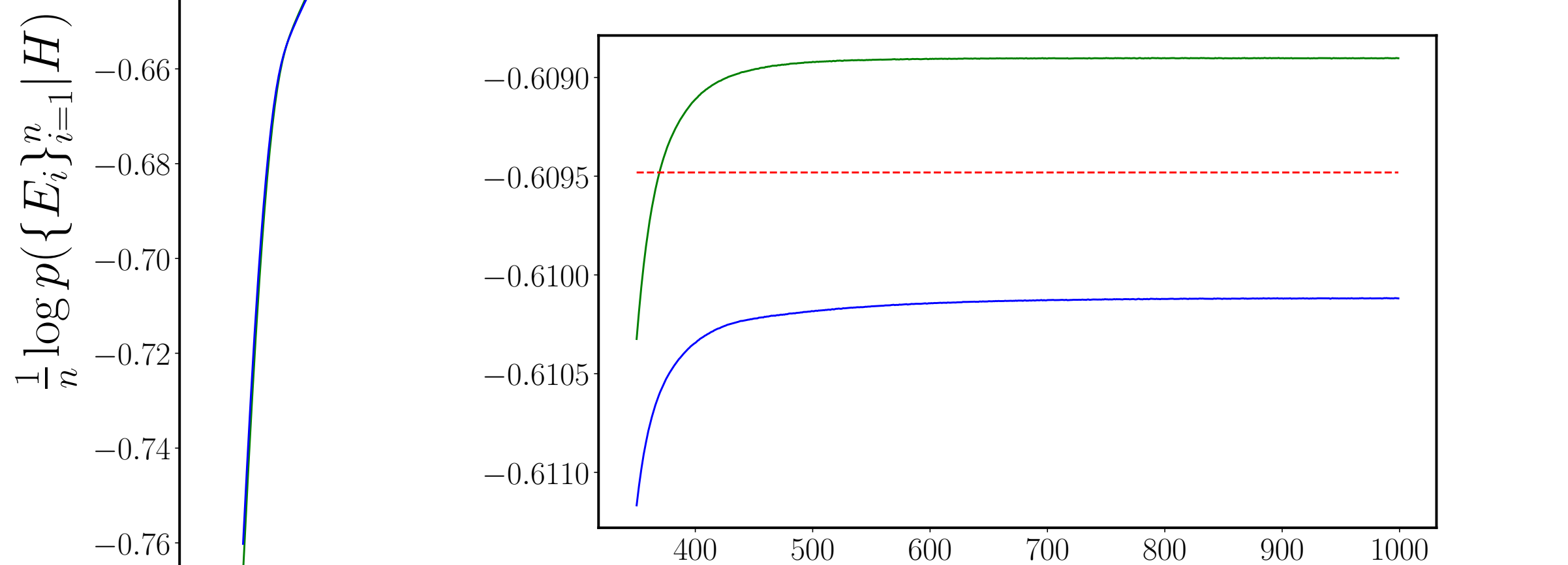
Логарифмическое правдоподобие  
на тренировочном наборе

$d_{ER} = 2$

$d_{ER} = 6$



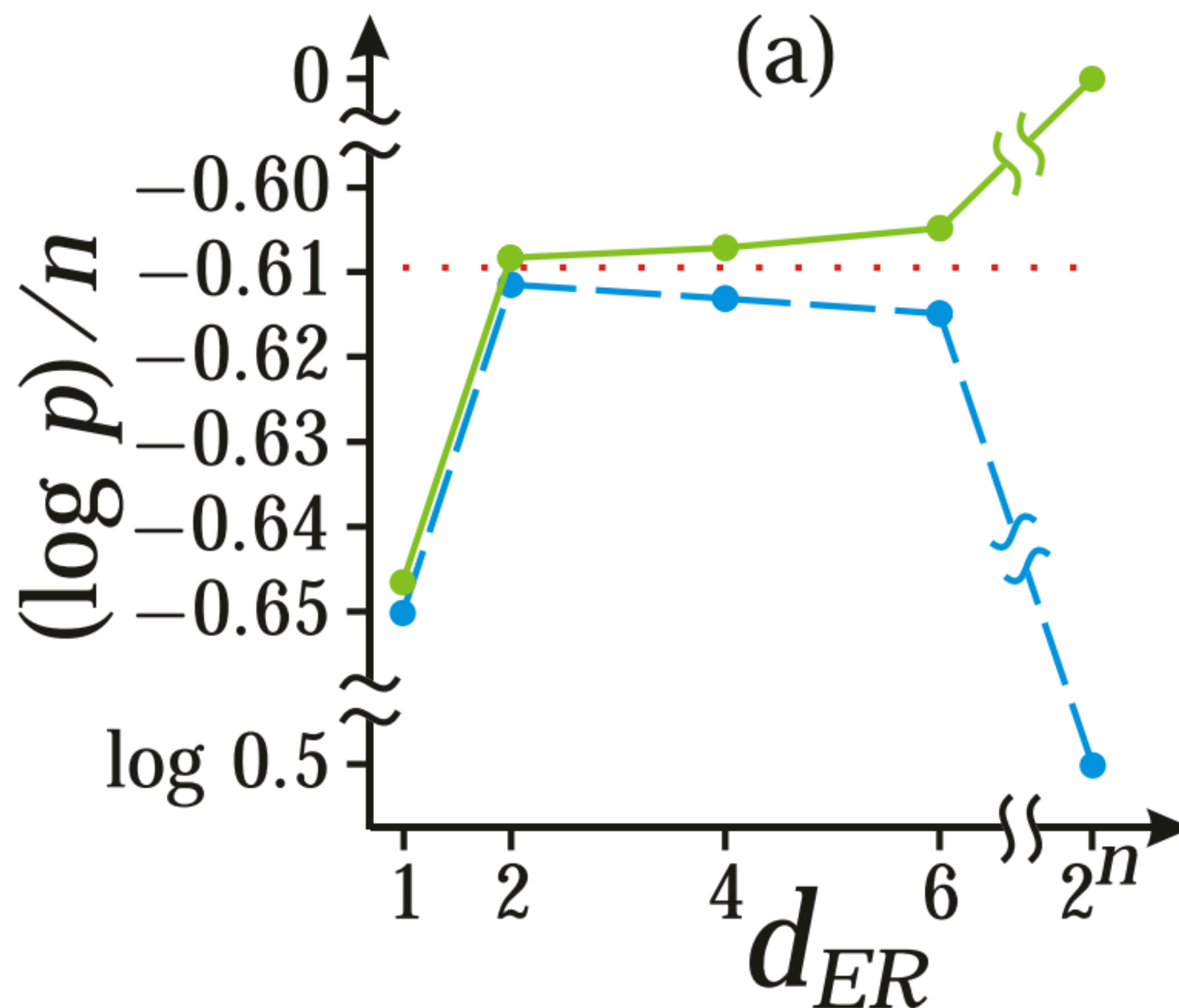
Логарифмическое правдоподобие  
на валидационном наборе







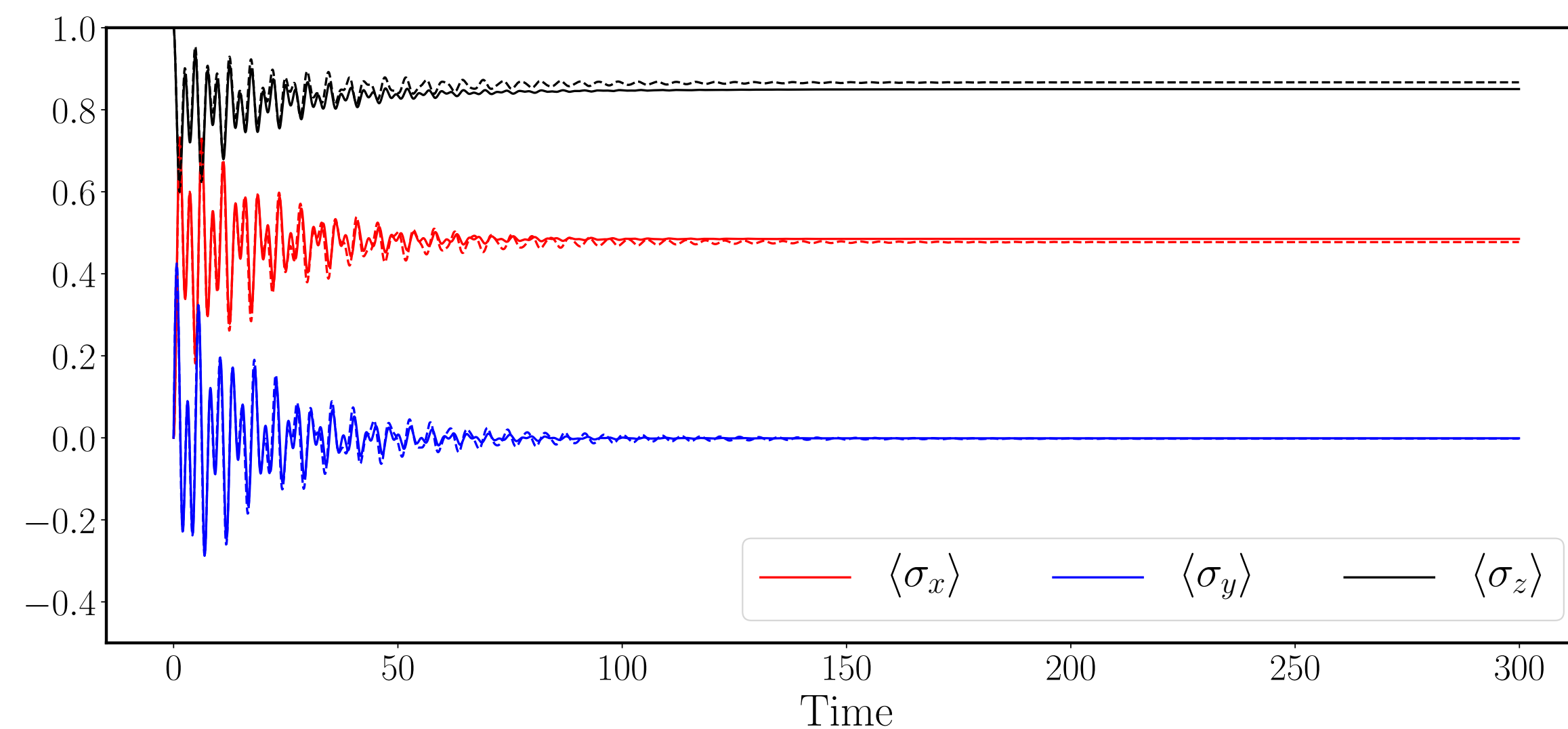
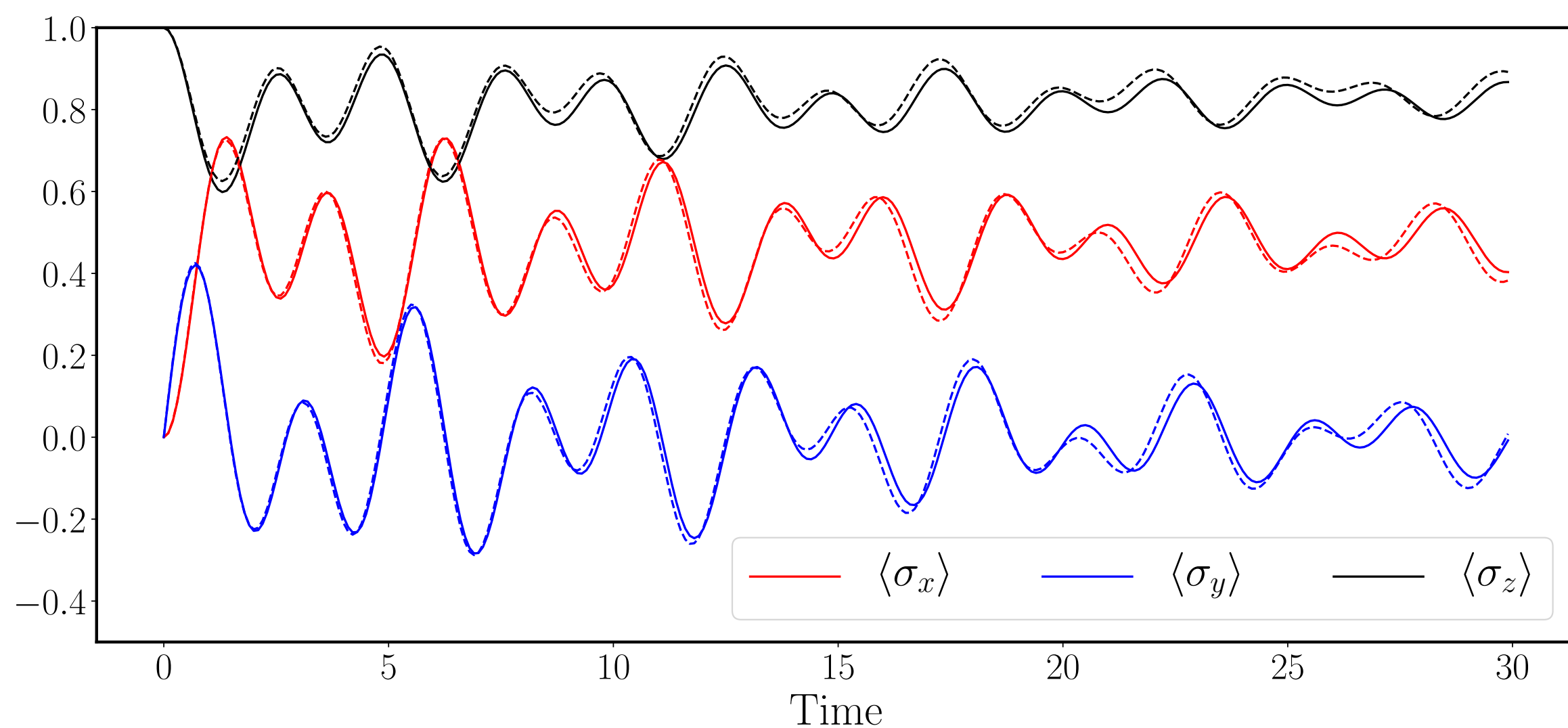
Определение размерности эффективного окружения по ошибке на валидационном наборе





# Предсказание немарковской квантовой динамики

Размер набора данных 100 000 результатов измерений

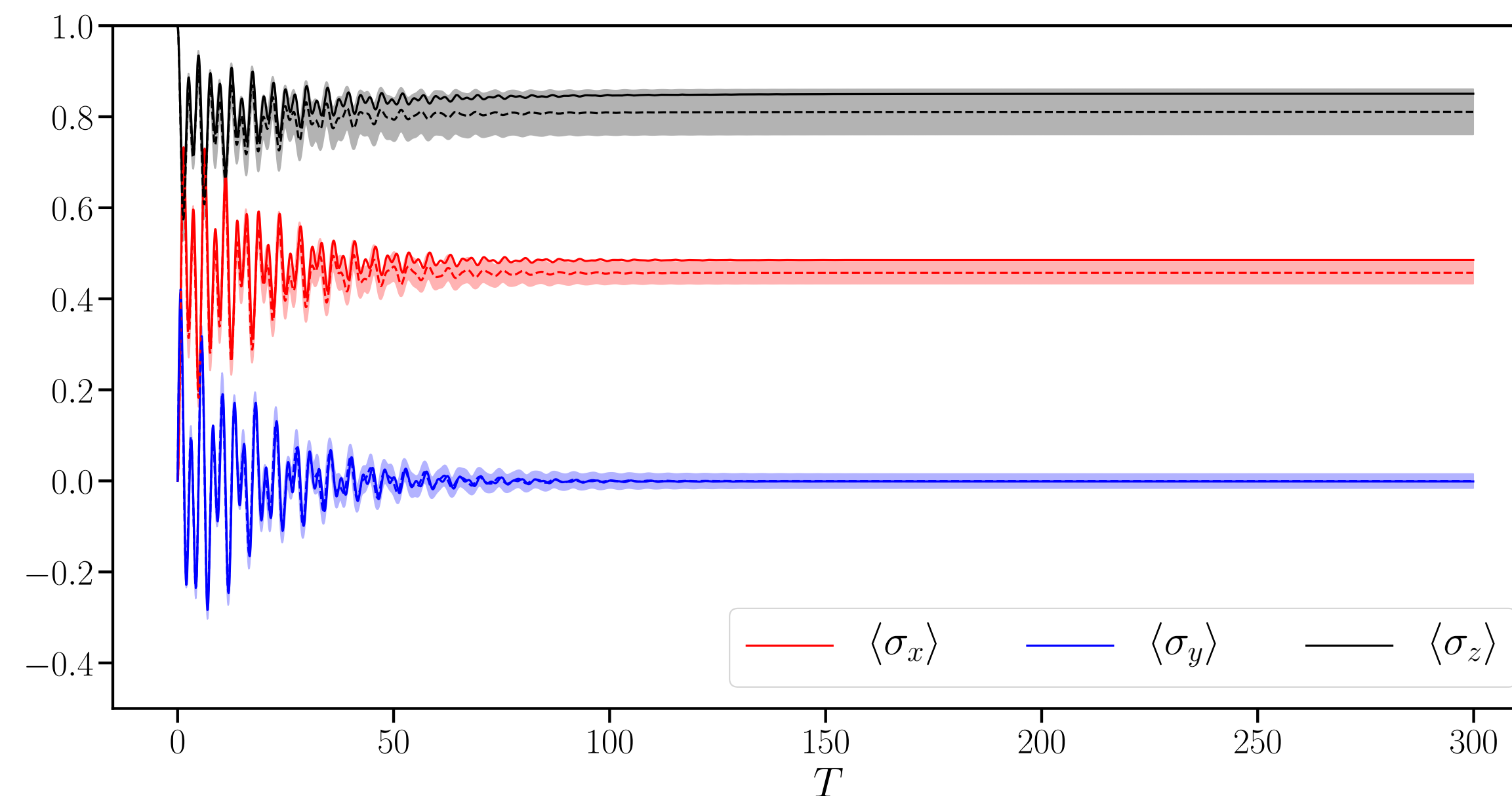
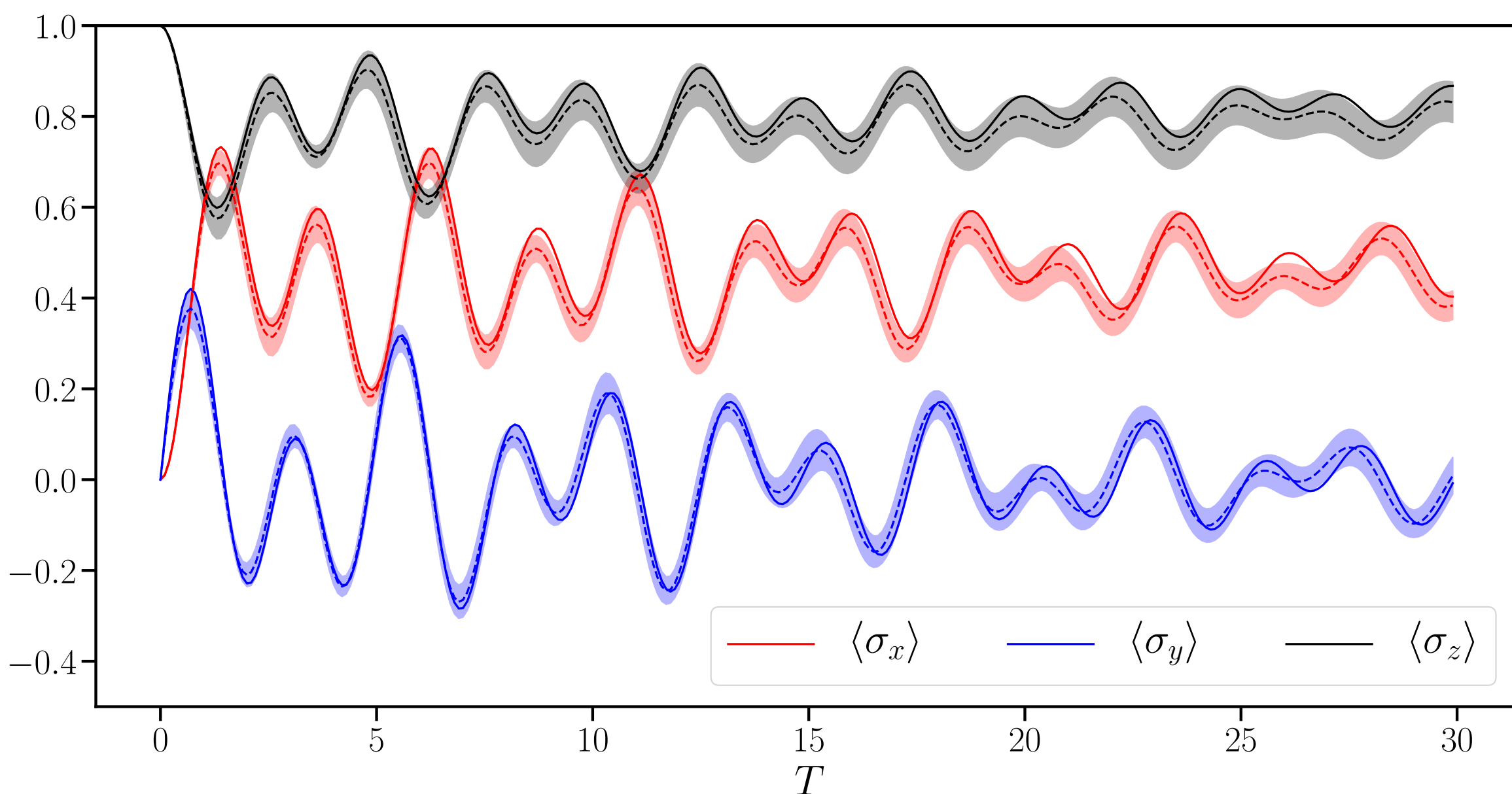






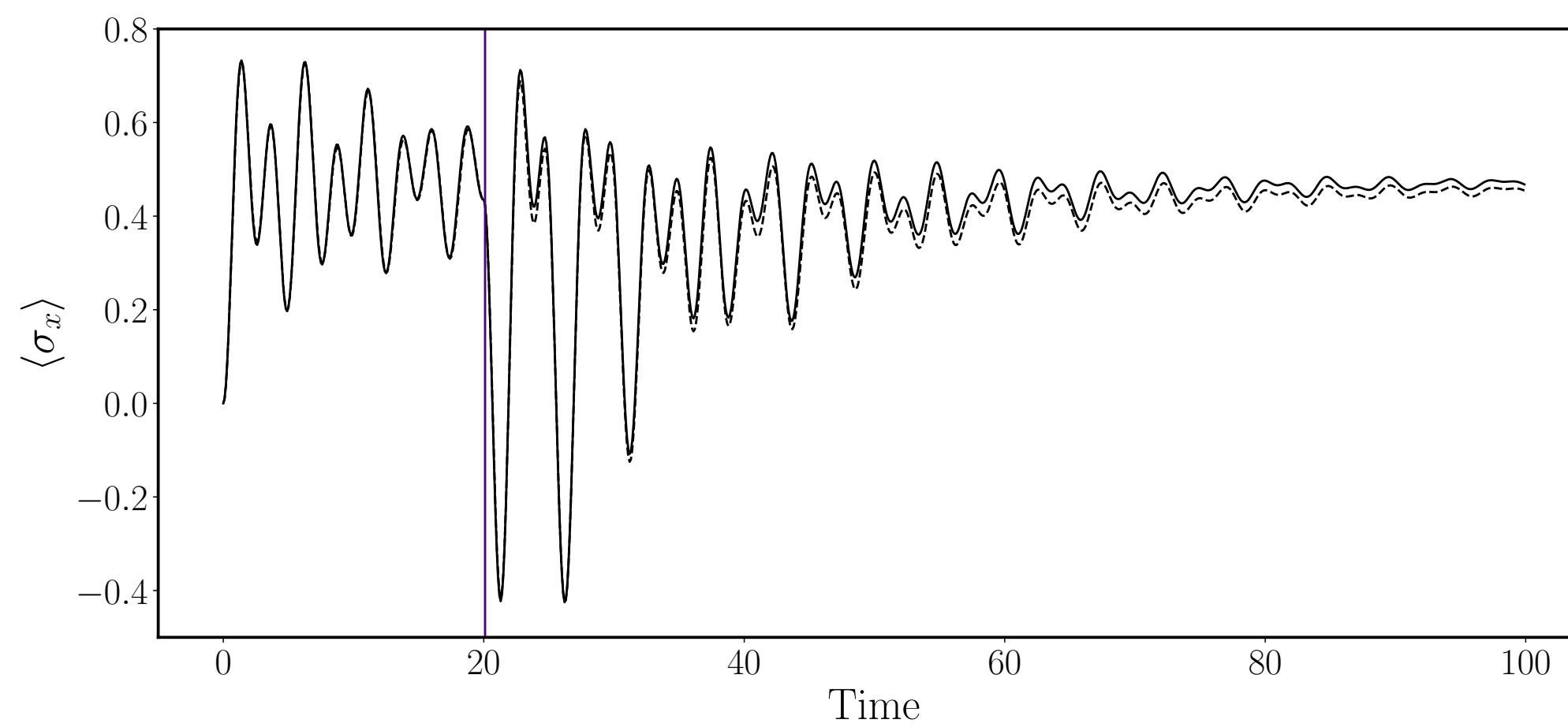
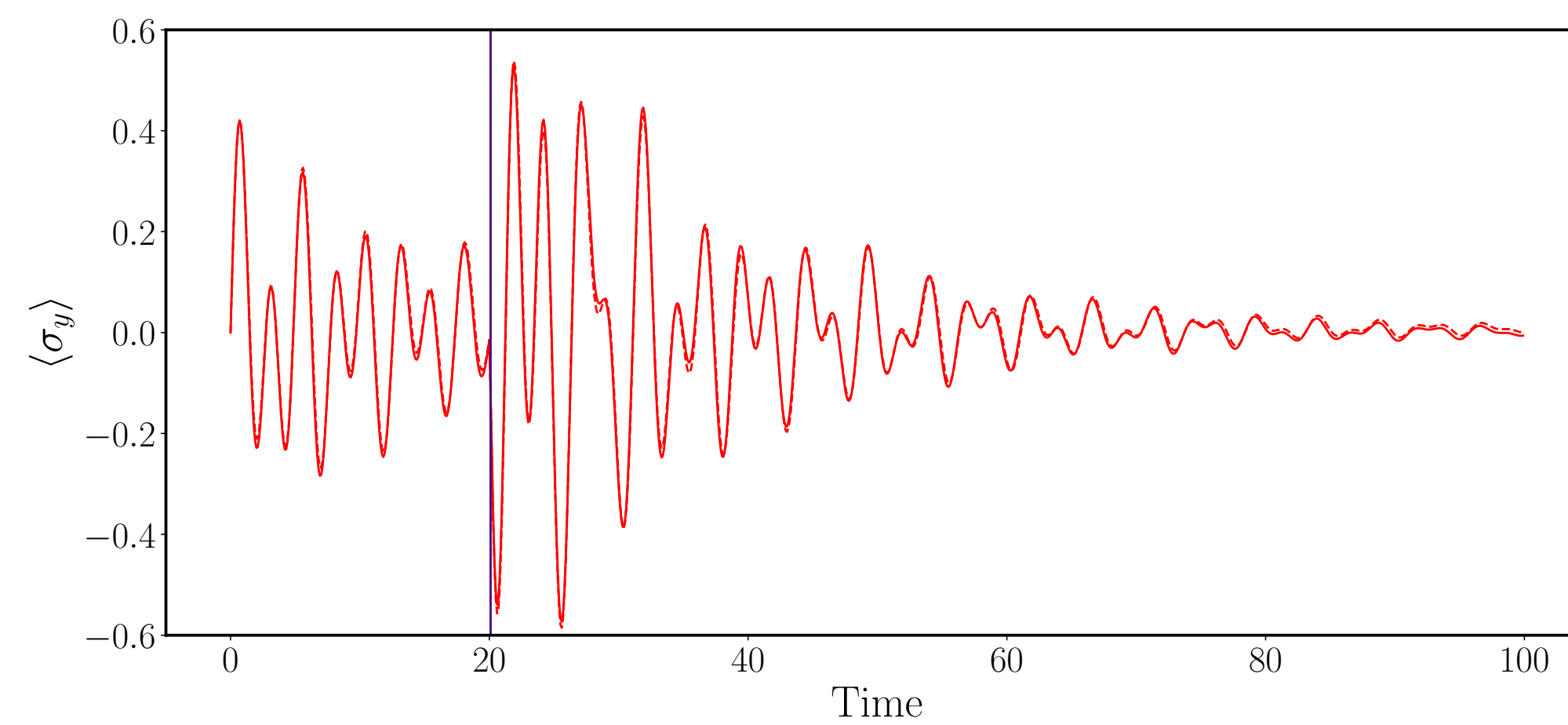
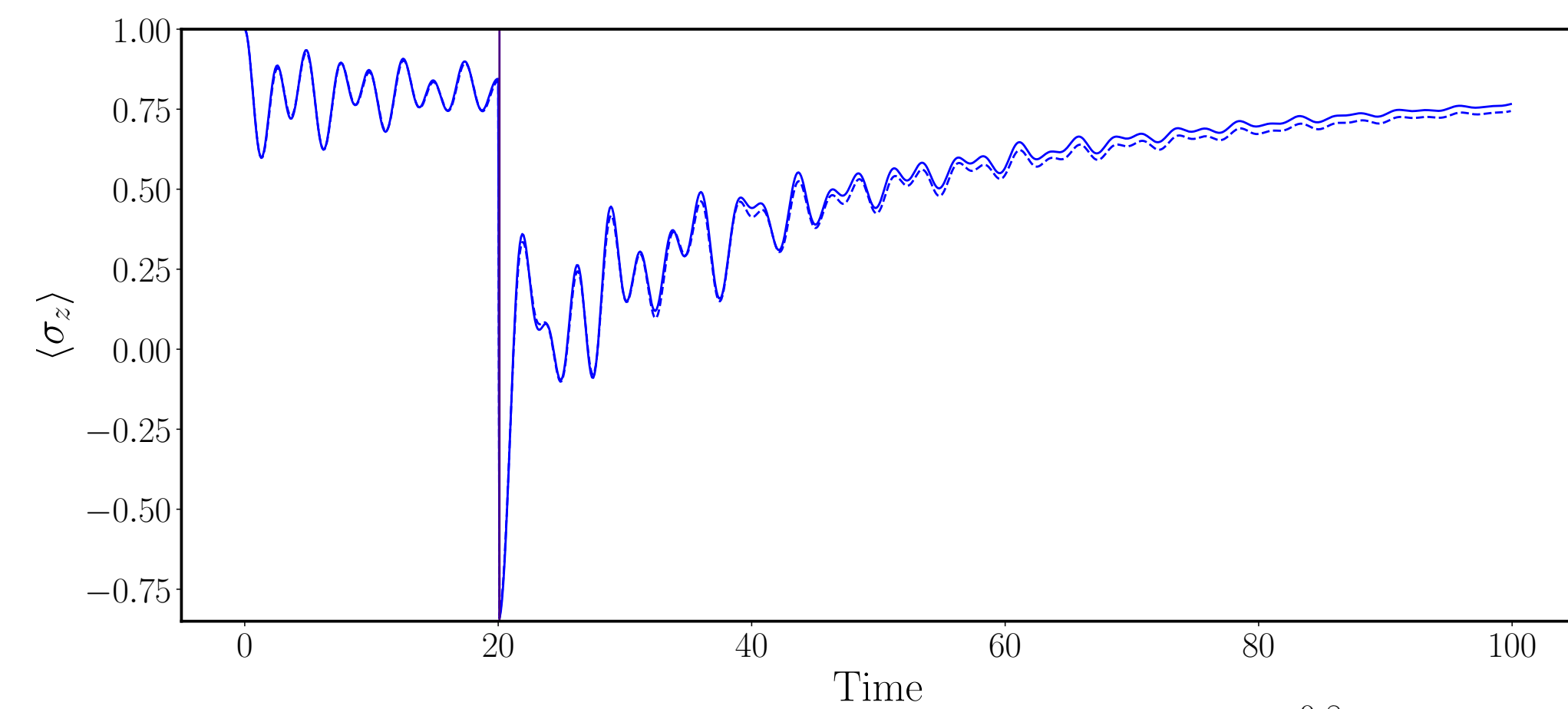
# Предсказание немарковской квантовой динамики (Байесовский вариант)

Размер набора данных 100 000 результатов измерений





# Предсказание отклика немарковской квантовой системы на внешнее возмущение





## Второе положение, выносимое на защиту

Результаты последовательных однократных проективных измерений над открытой квантовой системой позволяют установить вид генератора  $\mathcal{L}$  соответствующего марковского вложения, действующего в расширенном пространстве системы и эффективного окружения. Генератор  $\mathcal{L}$  восстанавливается алгоритмом, максимизирующим функцию правдоподобия для исходов измерений. Восстановленная динамика матрицы плотности системы дается выражением

$$\rho_S = \text{Tr}_{\text{ER}} [\exp(t\mathcal{L})\rho_{S+\text{ER}}(0)],$$

где ER обозначает степени свободы эффективного окружения.



## Квантовая динамика в стробоскопическом пределе

$$H = \gamma \sum_i A_i \otimes B_i$$

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_{\text{pr}}$$

$$P_i = |\phi\rangle\langle\phi| = \rho_{\text{pr}}$$

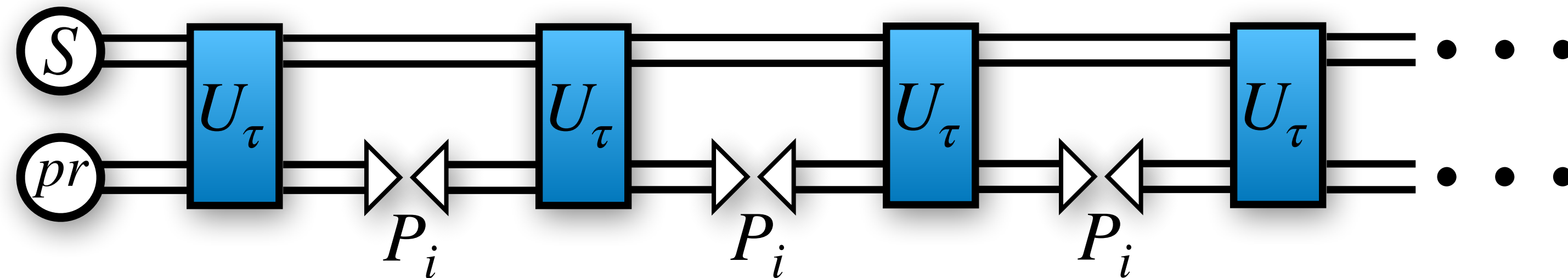


# Квантовая динамика в стробоскопическом пределе

$$H = \gamma \sum_i A_i \otimes B_i$$

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_{pr}$$

$$P_i = |\phi\rangle\langle\phi| = \rho_{pr}$$



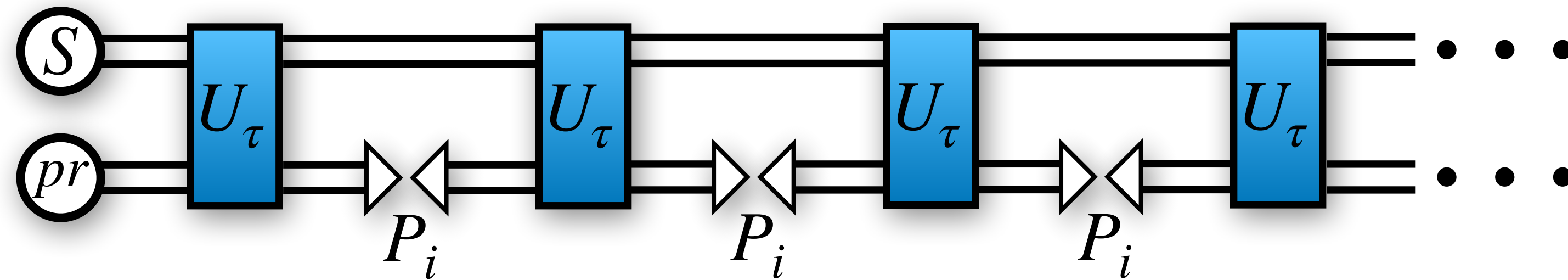


## Квантовая динамика в стробоскопическом пределе

$$H = \gamma \sum_i A_i \otimes B_i$$

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_{pr}$$

$$P_i = |\phi\rangle\langle\phi| = \rho_{pr}$$



$$\gamma^2 \tau = \Omega = \text{const}, \tau \rightarrow 0$$



## Квантовая динамика в стробоскопическом пределе

$$H_{\text{eff}} = H_1 - iH_2 + O(\sqrt{\tau})$$

$$H_1 = \gamma \sum_j A_j \langle B_j \rangle$$

$$H_2 = \frac{\Omega}{2} \sum_{jk} A_j A_k (\langle B_j B_k \rangle - \langle B_j \rangle \langle B_k \rangle)$$

$$i \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = (H_1 - iH_2) |\psi\rangle + \langle \psi | H_2 | \psi \rangle |\psi\rangle$$





## Квантовая динамика в стробоскопическом пределе

$$H_{\text{eff}} = H_1 - iH_2 + O(\sqrt{\tau})$$

$$H_1 = \gamma \sum_j A_j \langle B_j \rangle$$

$$H_2 = \frac{\Omega}{2} \sum_{jk} A_j A_k (\langle B_j B_k \rangle - \langle B_j \rangle \langle B_k \rangle)$$

$$i \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = (H_1 - iH_2) |\psi\rangle + \langle \psi | H_2 | \psi \rangle |\psi\rangle$$

**Пример:**  $H = \frac{\gamma}{2} \sum_i \sigma_j \otimes \sigma_j$



$$H_{\text{eff}} = \gamma |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - i \frac{\Omega}{2} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$$



## Квантовая динамика в стробоскопическом пределе

$$H_{\text{eff}} = H_1 - iH_2 + O(\sqrt{\tau})$$

$$H_1 = \gamma \sum_j A_j \langle B_j \rangle$$

$$H_2 = \frac{\Omega}{2} \sum_{jk} A_j A_k (\langle B_j B_k \rangle - \langle B_j \rangle \langle B_k \rangle)$$

$$i \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = (H_1 - iH_2) |\psi\rangle + \langle \psi | H_2 | \psi \rangle |\psi\rangle$$

**Пример:**  $H = \frac{\gamma}{2} \sum_i \sigma_j \otimes \sigma_j$

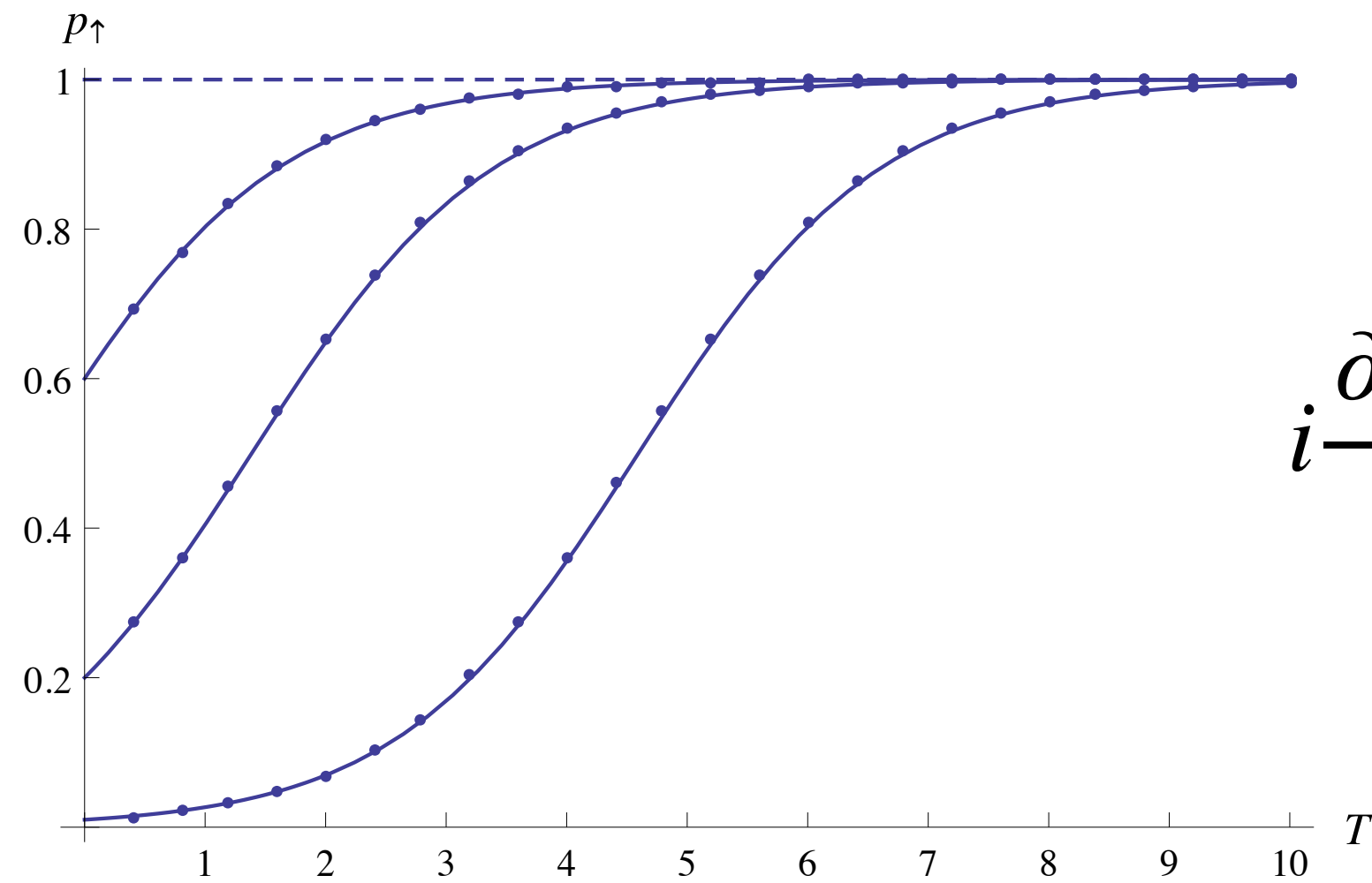


$$H_{\text{eff}} = \gamma |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - i \frac{\Omega}{2} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$$

Chu, Y., Liu, Y., Liu, H., & Cai, J. (2020). Quantum sensing with a single-qubit pseudo-Hermitian system. *Physical Review Letters*, 124(2), 020501.

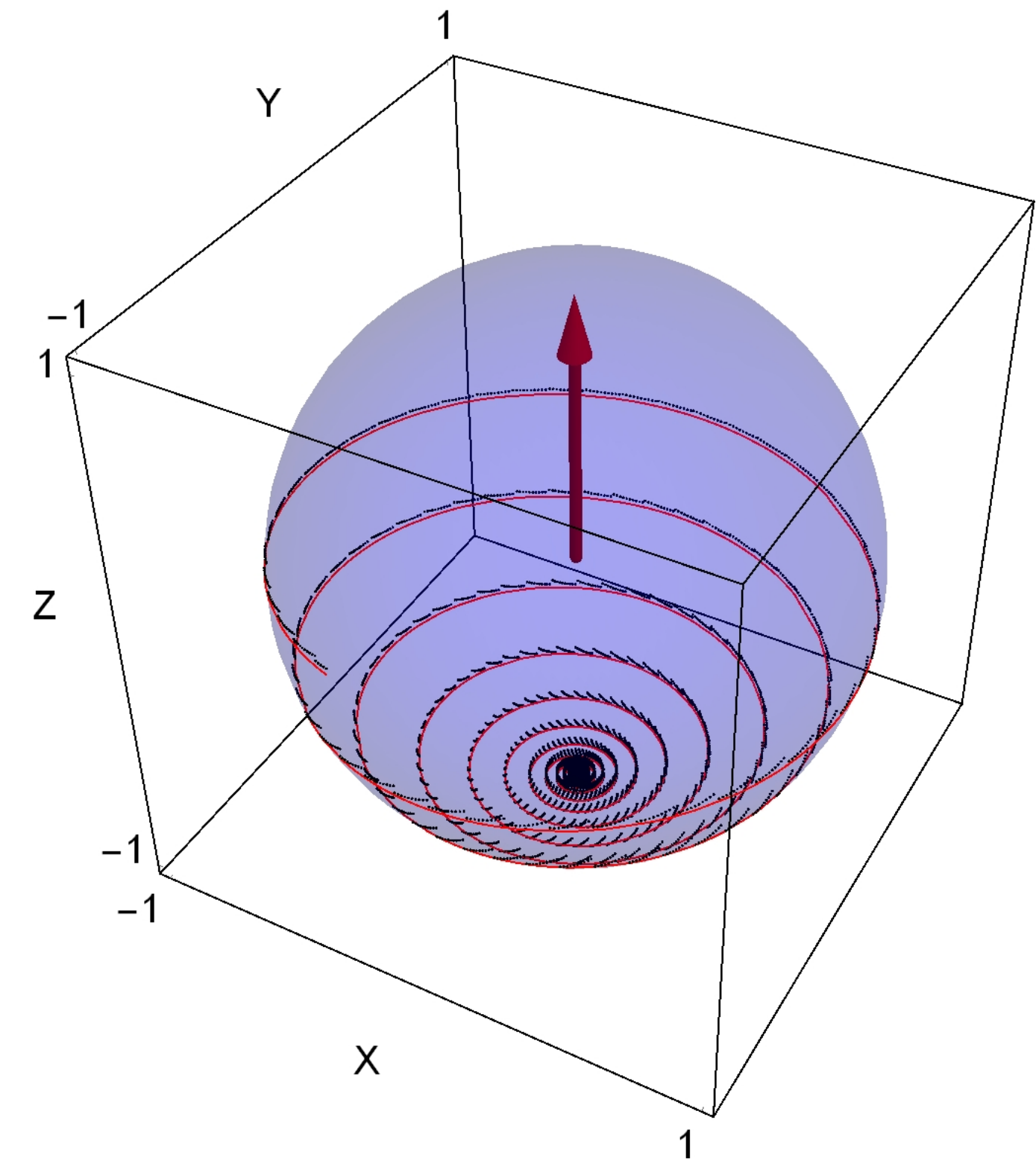


# Квантовая динамика в стробоскопическом пределе (пример)



$\gamma = 5, \tau = 0.04, \Omega = 1$

$$i \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = (H_1 - iH_2) |\psi\rangle + \langle \psi | H_2 | \psi \rangle |\psi\rangle$$

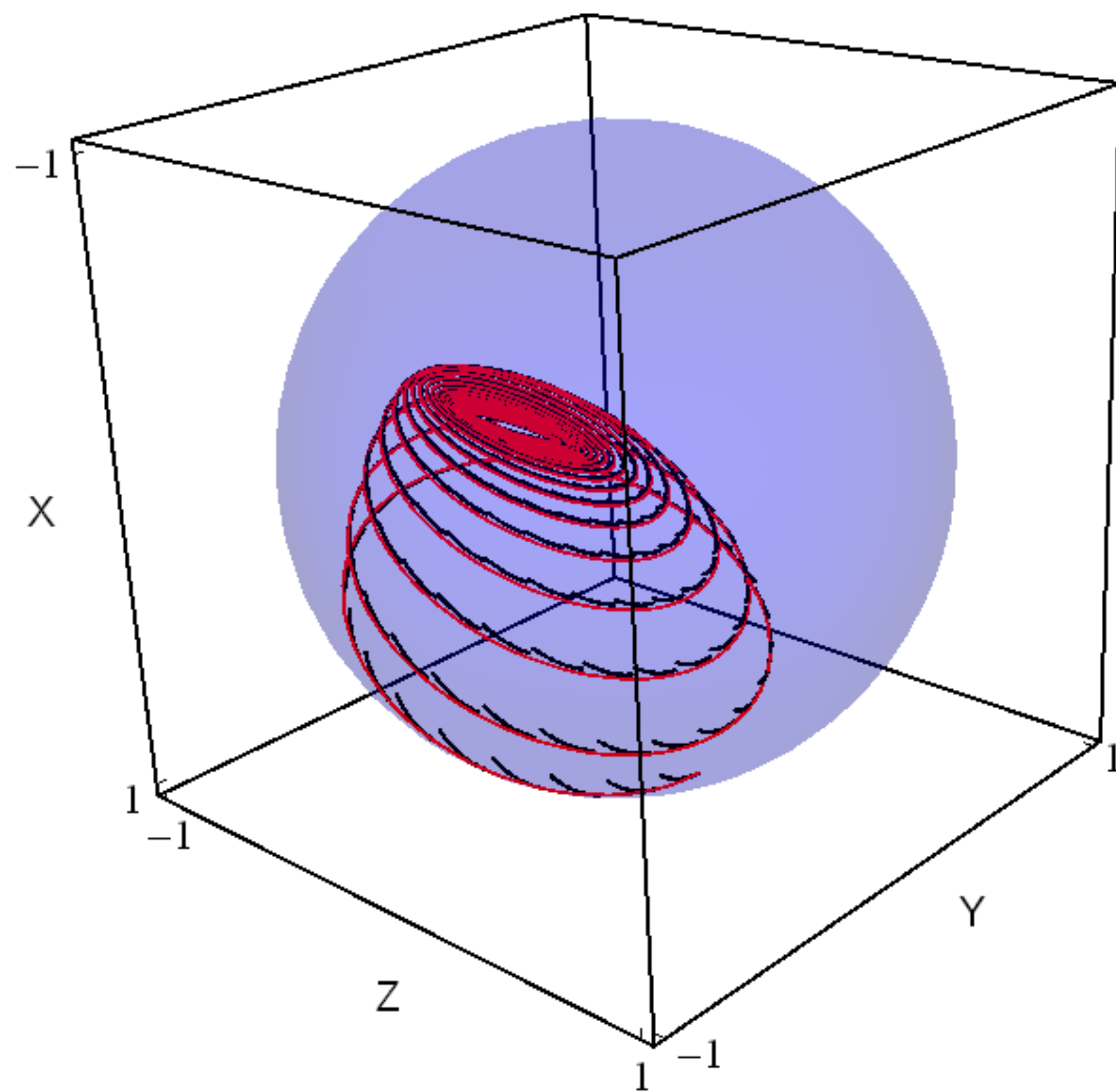


$\gamma = 1.5, \tau = 0.044, \Omega = 0.1$

Luchnikov, I. A., & Filippov, S. N. (2017). Quantum evolution in the stroboscopic limit of repeated measurements. *Physical Review A*, 95(2), 022113.



# Динамика индуцированная измерениями ранга $r > 1$





## Третье положение, выносимое на защиту

Последовательные проективные измерения над вспомогательной (второй) частью двусоставной квантовой системы с гамильтонианом  $H = \gamma \sum_k A_j \otimes B_j$ , повторяющиеся с периодом  $\tau$  и сопровождающиеся наблюдением одинаковых исходов, отвечающих проектору  $P$ , вызывают нетривиальную динамику в подпространстве  $\mathcal{H}_S \otimes \text{supp}P$ , где  $\mathcal{H}_S$  — пространство основной (первой) части составной системы. В пределе  $\gamma\tau \rightarrow 0$ ,  $\gamma^2\tau \rightarrow \Omega = \text{const}$  динамика системы в целом задается эффективным неэрмитовым гамильтонианом

$$H_{\text{eff}} = H_1 - iH_2,$$

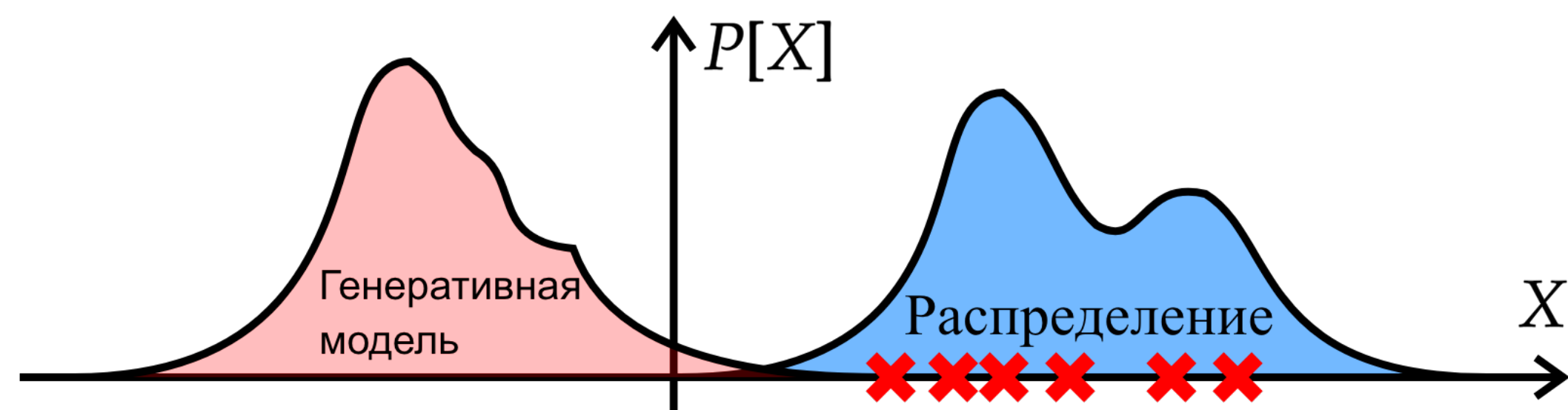
$$H_1 = \gamma \sum_j A_j \otimes G_j,$$

$$H_2 = \frac{\Omega}{2} \sum_{jk} A_j A_k \otimes (G_{jk} - G_j G_k),$$

где  $G_j = PB_jP$ ,  $G_{jk} = PB_jB_kP$



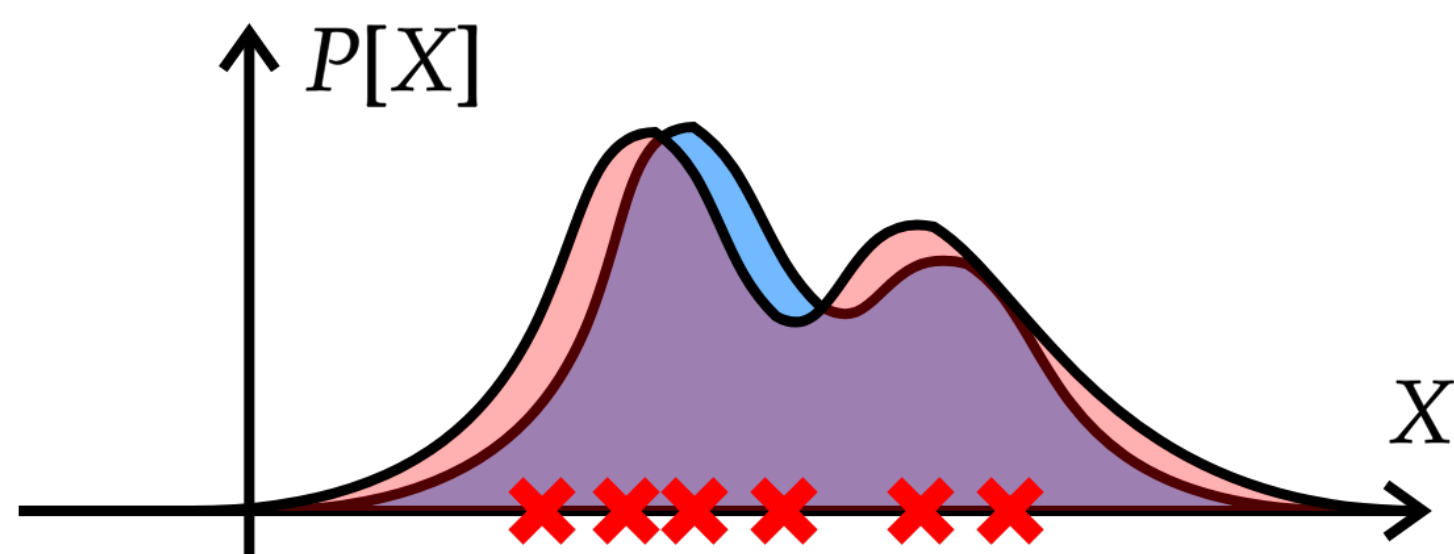
# Генеративные модели



Обучение



× : выборка







# Типы генеративных моделей

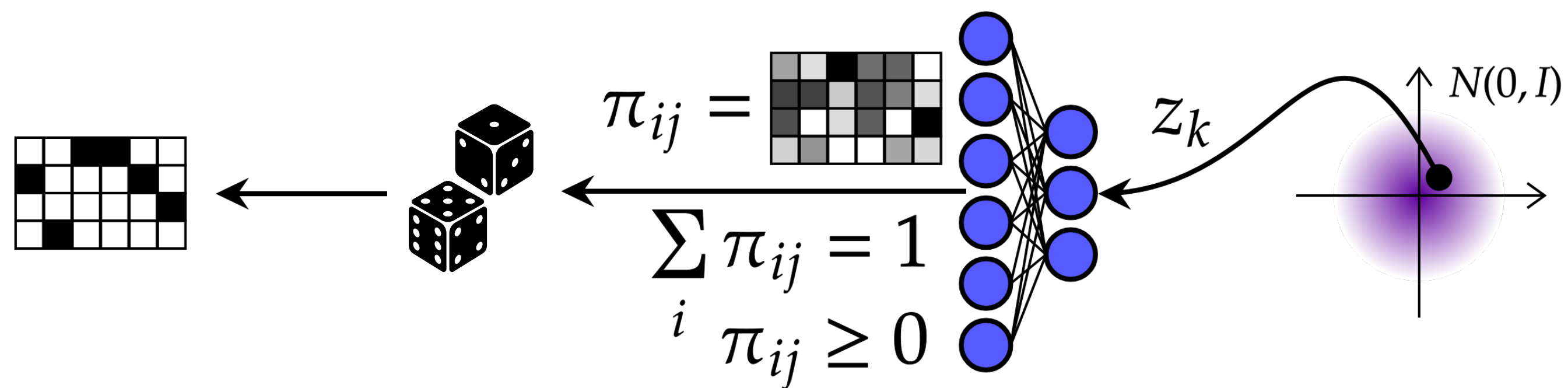
Name	Training Cost	Data Space	Latent Space	Architecture	Sampling	Likelihood	Expressibility	Difficulty (Learn/Sample)
RBM	Log-likelihood	Arbitrary	Arbitrary	Bipartite	MCMC	Intractable partition function	★	☠☠☠/☠☠☠
DBM	ELBO	Arbitrary	Arbitrary	Bipartite	MCMC	Intractable partition function & posterior	★★★	☠☠☠/☠☠☠
Autoregressive Model	Log-likelihood	Arbitrary	None	Ordering	Sequential	Tractable	★★	☠/☠☠
Normalizing Flow	Log-likelihood	Continuous	Continuous, Same dimension as data	Bijector	Parallel	Tractable	★★	☠/☠
VAE	ELBO	Arbitrary	Continuous	Arbitrary?	Parallel	Intractable posterior	★★★	☠/☠
MPS/TTN	Log-likelihood	Arbitrary?	None or tree tensor	No loop	Sequential	Tractable	★★★	☠☠☠/☠☠☠
GAN	Adversarial	Continuous	Arbitrary?	Arbitrary	Parallel	Implicit	★★★★★	☠☠☠☠☠/☠
Quantum Circuit	Adversarial	Discrete	Discrete	Arbitrary	Parallel	Implicit	★★★★★	☠☠☠☠☠☠/☠

Таблица взята из лекций Lei Wang по генеративным моделям:  
<https://wangleiphy.github.io/lectures/PILtutorial.pdf>



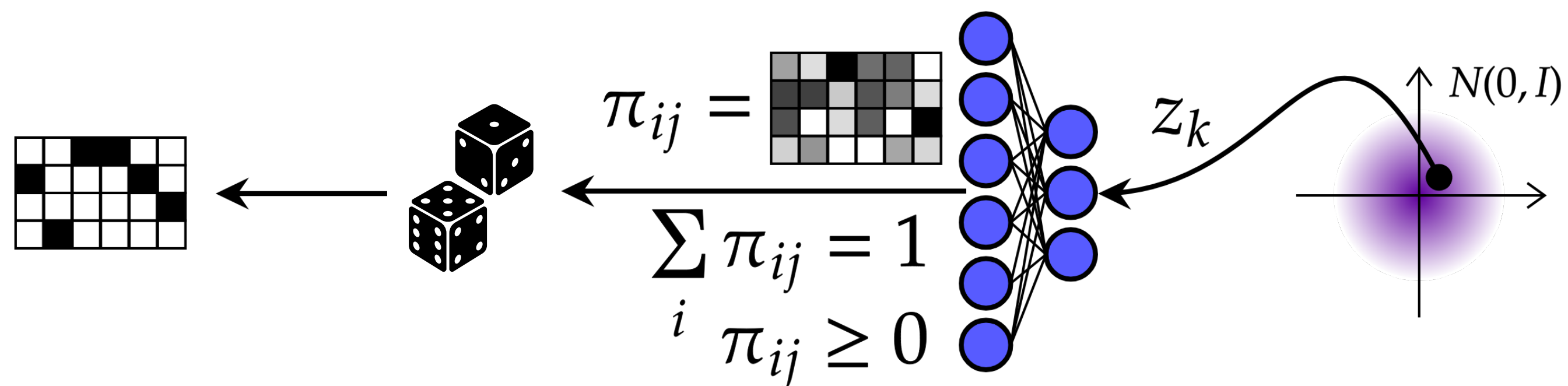


# Вариационный автокодировщик





# Вариационный автокодировщик

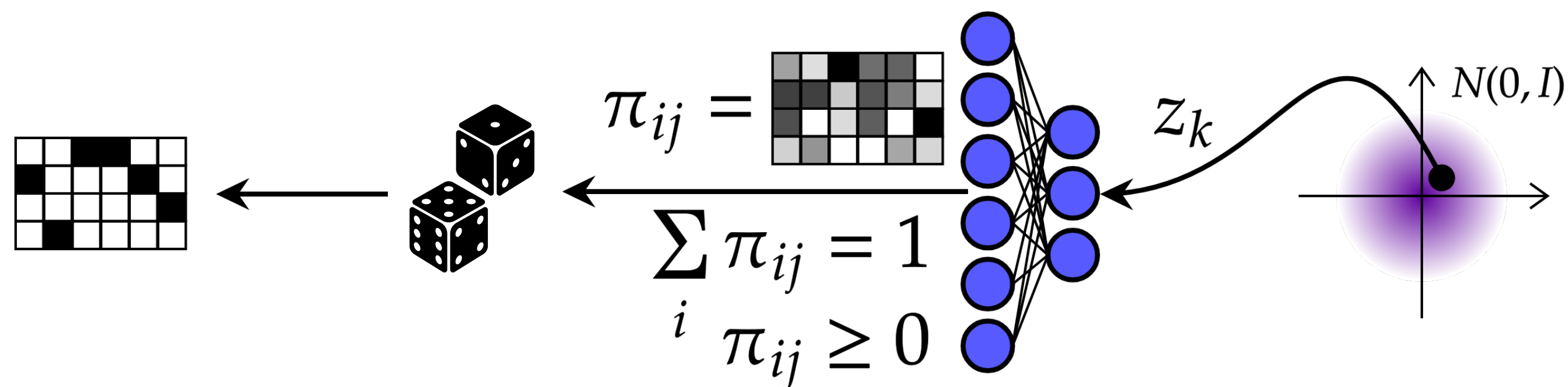


**Неполный функционал правдоподобия:**

$$P[x | \theta] = \int P[x | z, \theta] P[z] dz$$



# Вариационный автокодировщик



**Неполный функционал  
правдоподобия:**

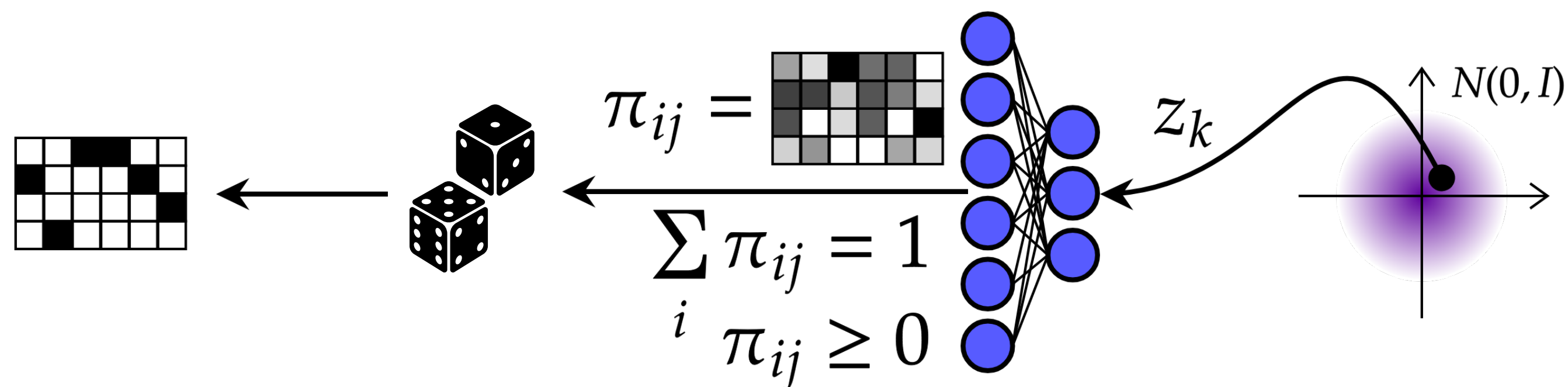
$$P[x | \theta] = \int P[x | z, \theta] P[z] dz$$

**Априорное  
распределение:**

$$P[z] = N(0, I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \exp\left(-\sum_{i=1}^n \frac{z_i^2}{2}\right)$$



# Вариационный автокодировщик



**Неполный функционал правдоподобия:**

$$P[x | \theta] = \int P[x | z, \theta] P[z] dz$$

**Априорное распределение:**

$$P[z] = N(0, I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \exp\left(-\sum_{i=1}^n \frac{z_i^2}{2}\right)$$

**Вероятность перехода:**

$$P[x | z, \theta] = \prod_{i=1, j=1}^{i=4, j=N} \pi_{ij}(\theta)^{x_{ij}}$$



# Генеративная модель как квантовое состояние

$M^\alpha$  – IC POVM



## Генеративная модель как квантовое состояние

$M^\alpha$  — IC POVM

$$P_\alpha = \text{Tr}[M^\alpha \rho] \longleftrightarrow \rho = \sum_\alpha P_\alpha [M^\alpha]^{-1}$$

$$[M^\alpha]^{-1} = \sum_{\alpha'} T_{\alpha\alpha'}^{-1} M^{\alpha'}$$
$$T_{\alpha\alpha'} = \text{Tr}(M^\alpha M^{\alpha'})$$

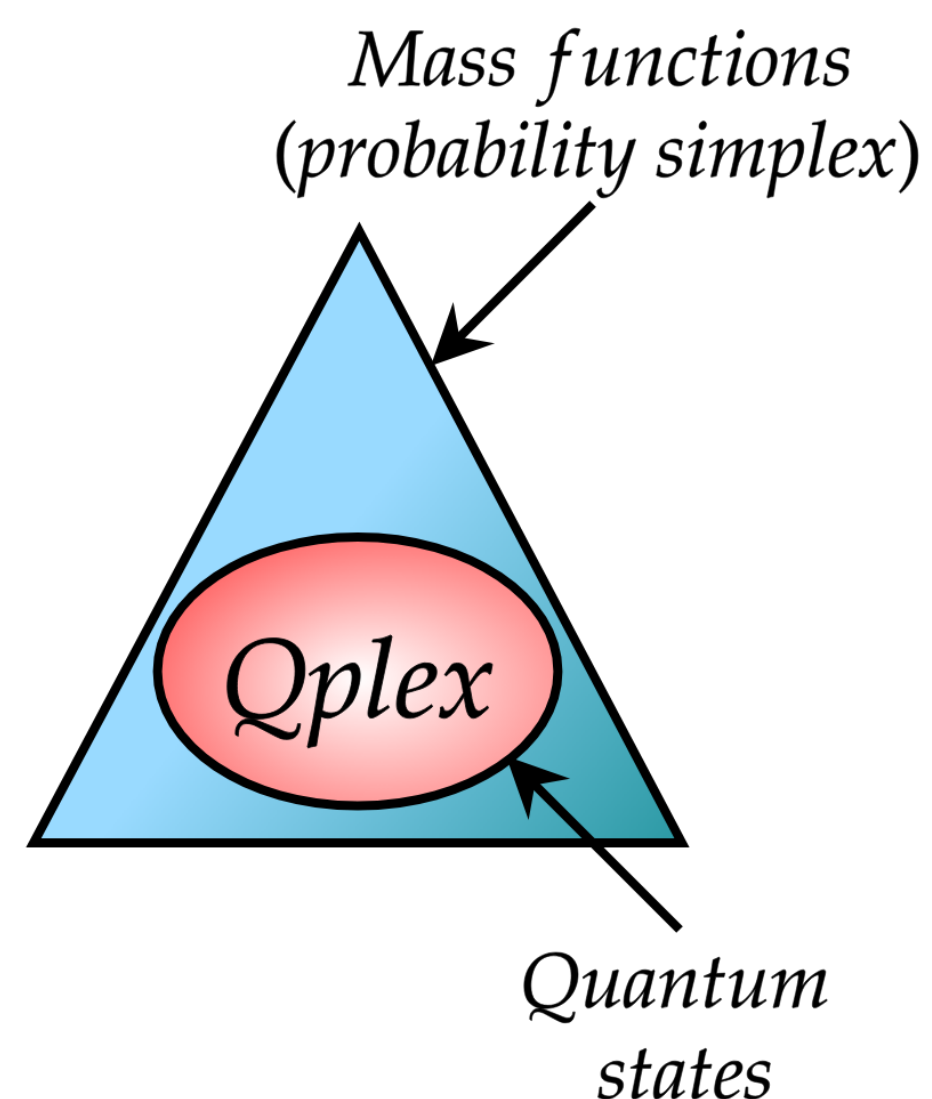


## Генеративная модель как квантовое состояние

$M^\alpha$  – IC POVM

$$P_\alpha = \text{Tr}[M^\alpha \rho] \longleftrightarrow \rho = \sum_\alpha P_\alpha [M^\alpha]^{-1}$$

$$[M^\alpha]^{-1} = \sum_{\alpha'} T_{\alpha\alpha'}^{-1} M^{\alpha'}$$
$$T_{\alpha\alpha'} = \text{Tr}(M^\alpha M^{\alpha'})$$



Carrasquilla, J., Torlai, G., Melko, R.G. *et al.* Reconstructing quantum states with generative models. *Nat Mach Intell* **1**, 155–161 (2019) doi:10.1038/s42256-019-0028-1

Appleby, M., Fuchs, C.A., Stacey, B.C. *et al.* *Eur. Phys. J. D* (2017) 71: 197. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2017-80024-y>

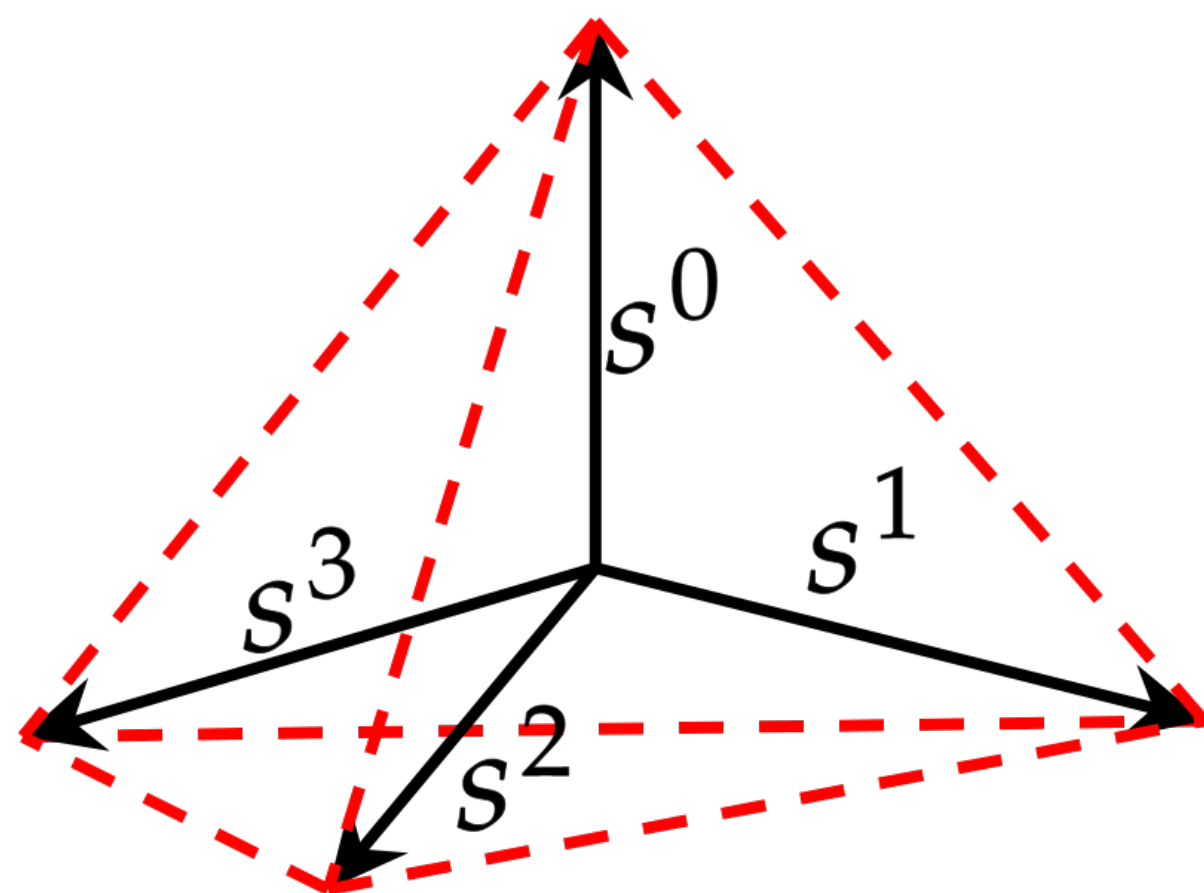




# Многочастичный IS POVM

**Тетраэдральный  
POVM:**

$$M_{\text{tetra}}^{\alpha} = \frac{1}{4}(I + s^{\alpha}\sigma)$$



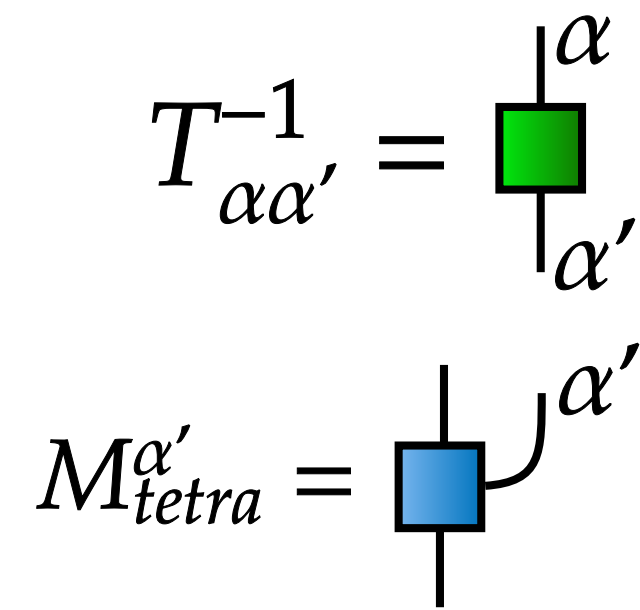
**Многочастичный  
тетраэдральный  
POVM:**

$$M_{\text{tetra}}^{\alpha_1, \dots, \alpha_N} = M_{\text{tetra}}^{\alpha_1} \otimes M_{\text{tetra}}^{\alpha_2} \otimes \dots \otimes M_{\text{tetra}}^{\alpha_N}$$

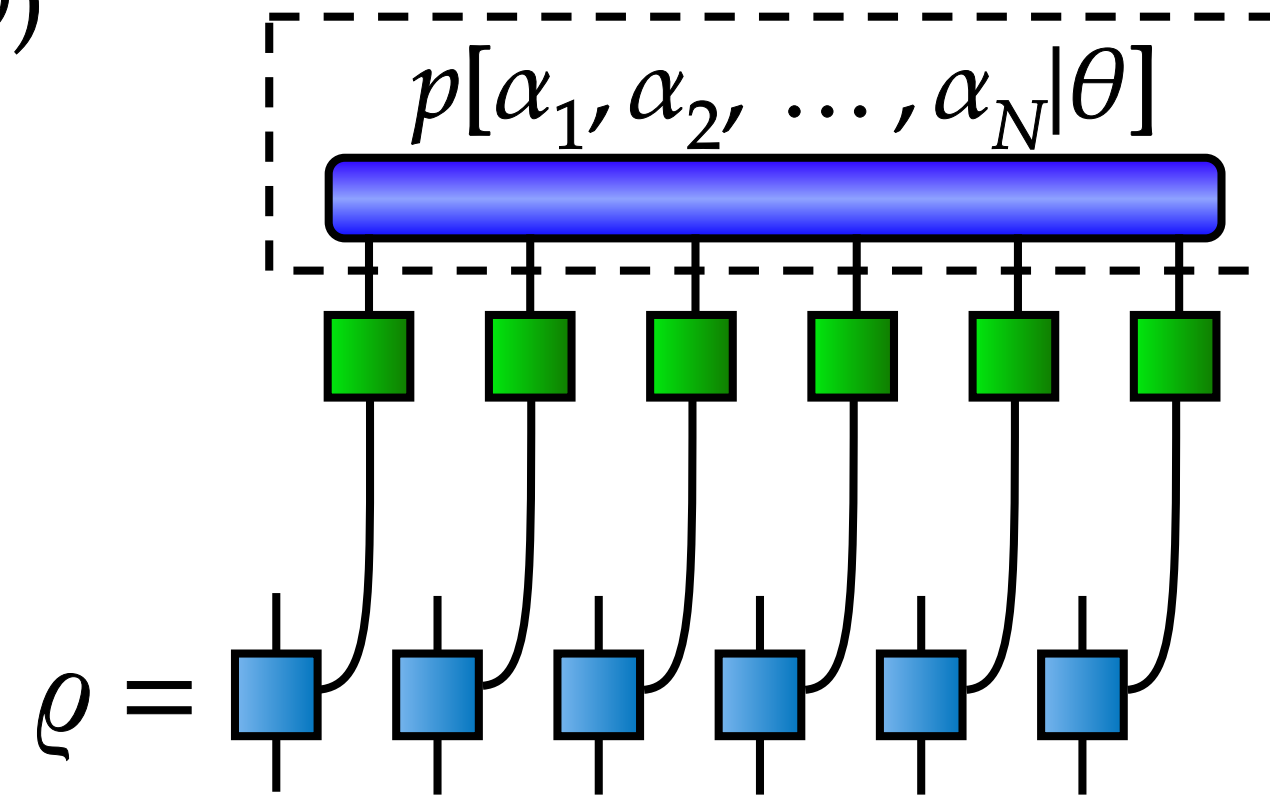


# Генеративная модель как квантовое состояние

a)



b)





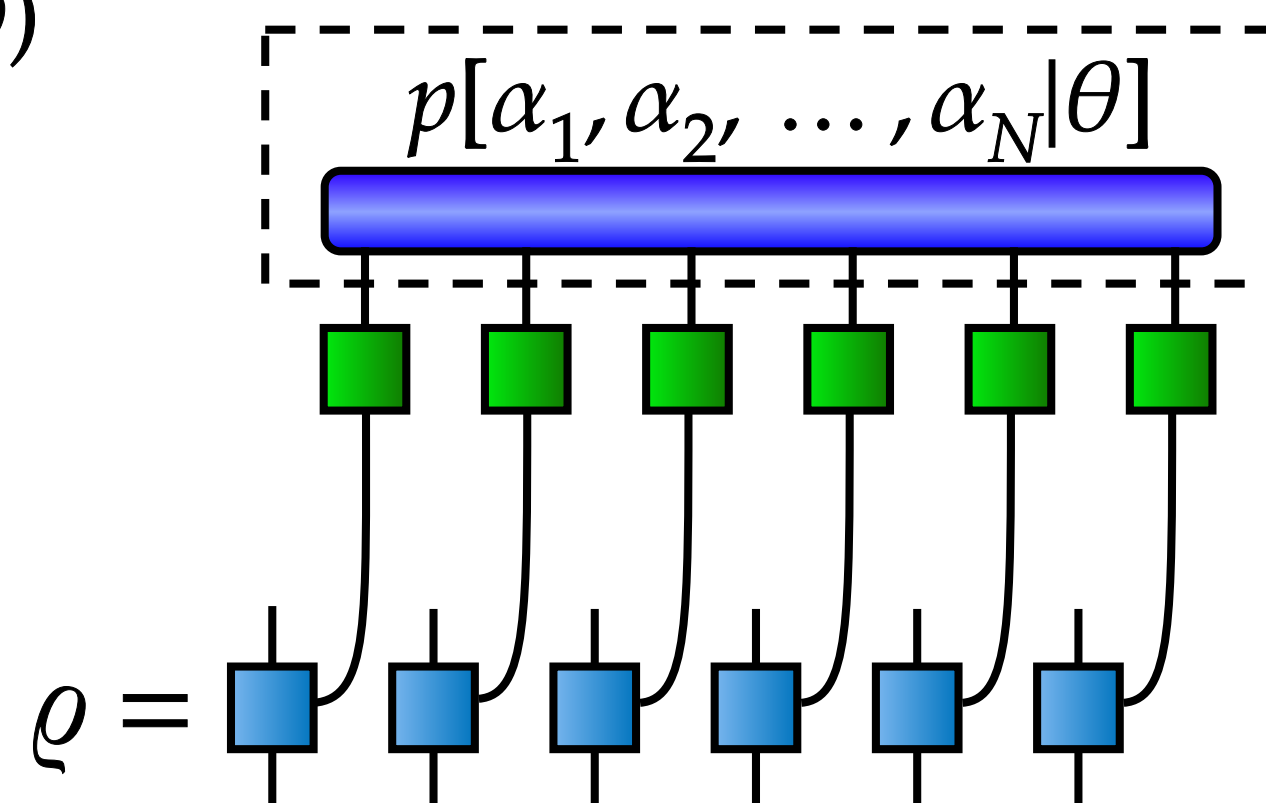
## Генеративная модель как квантовое состояние

a)

$$T_{\alpha\alpha'}^{-1} = \begin{array}{c} \alpha \\ \text{■} \\ \alpha' \end{array}$$

$$M_{tetra}^{\alpha'} = \begin{array}{c} \alpha' \\ \text{■} \\ \text{---} \end{array}$$

b)



$$\langle \sigma_i^x \sigma_j^x \rangle = \text{Tr}(\rho \sigma_i^x \sigma_j^x) =$$

$$\approx \frac{1}{M} \sum_k$$



# Численные эксперименты

Генеративная модель:

$$p[x | \theta, h] = \int p[x | z, \theta, h] p[z] dz$$

Внешнее магнитное поле



# Численные эксперименты

**Генеративная модель:**

$$p[x | \theta, h] = \int p[x | z, \theta, h] p[z] dz$$

Внешнее магнитное поле

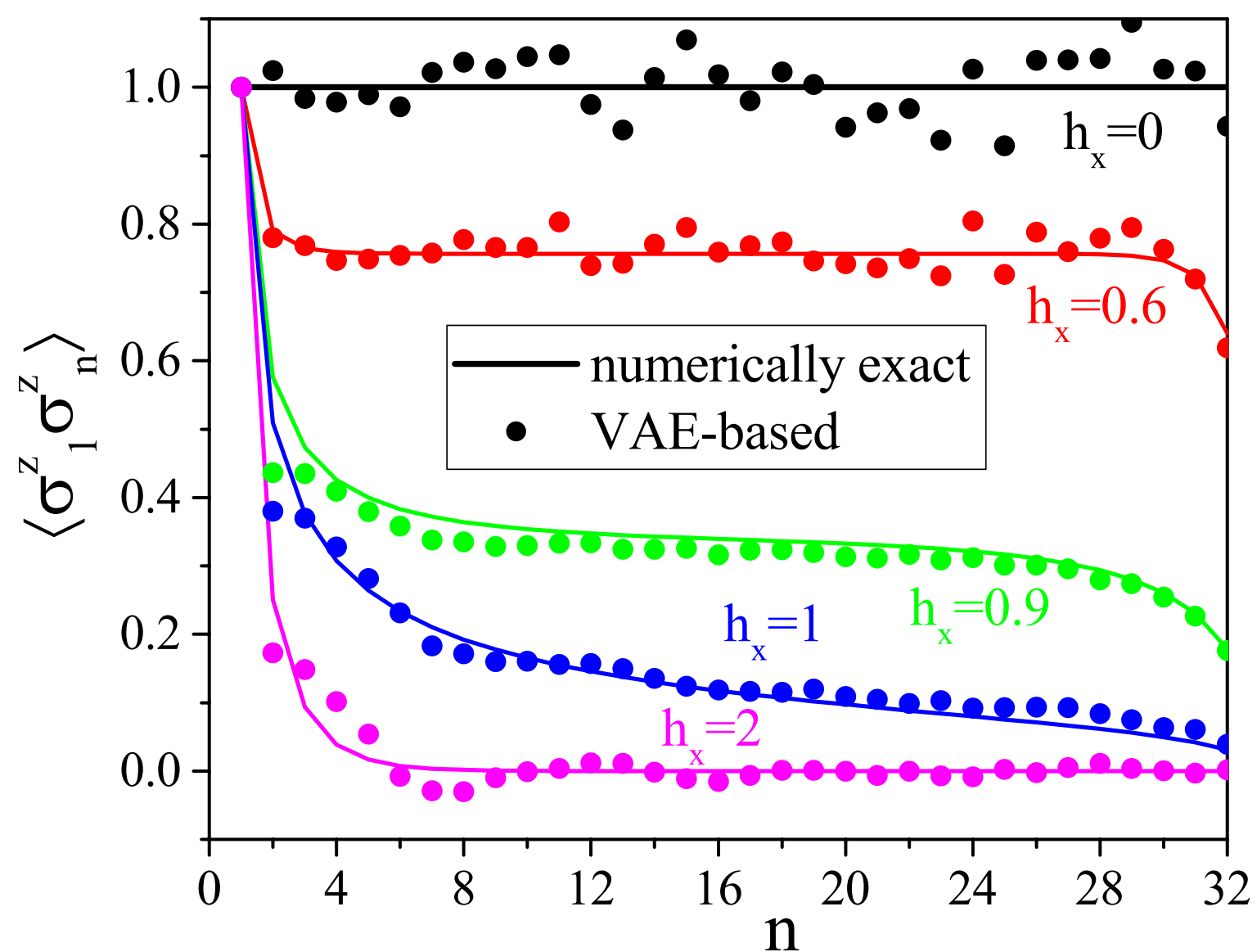
**Квантовое состояние:**

$$|\Omega(h)\rangle = \arg \min_{|\psi(h)\rangle} \frac{\langle \psi(h) | H | \psi(h) \rangle}{\langle \psi(h) | \psi(h) \rangle}$$

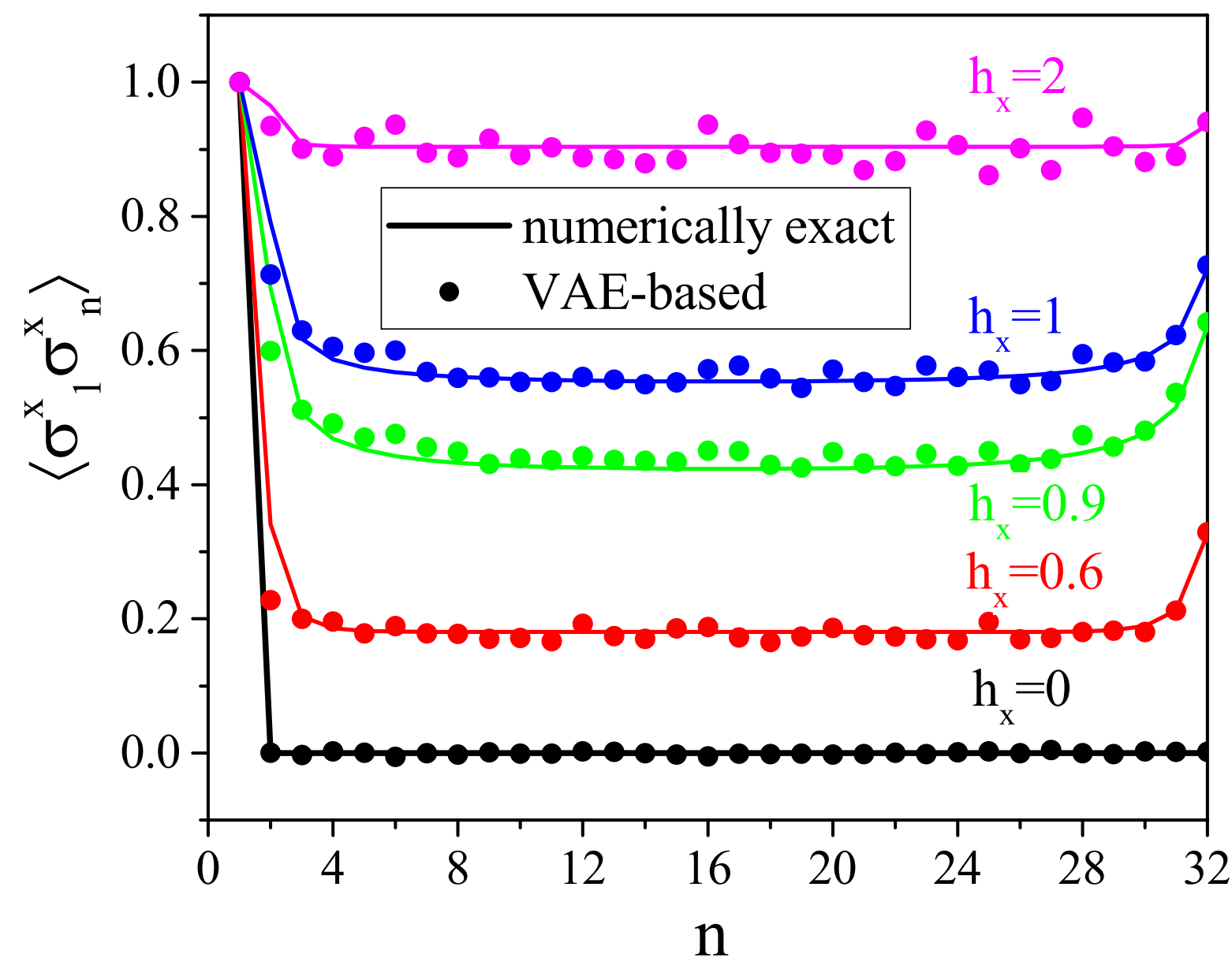
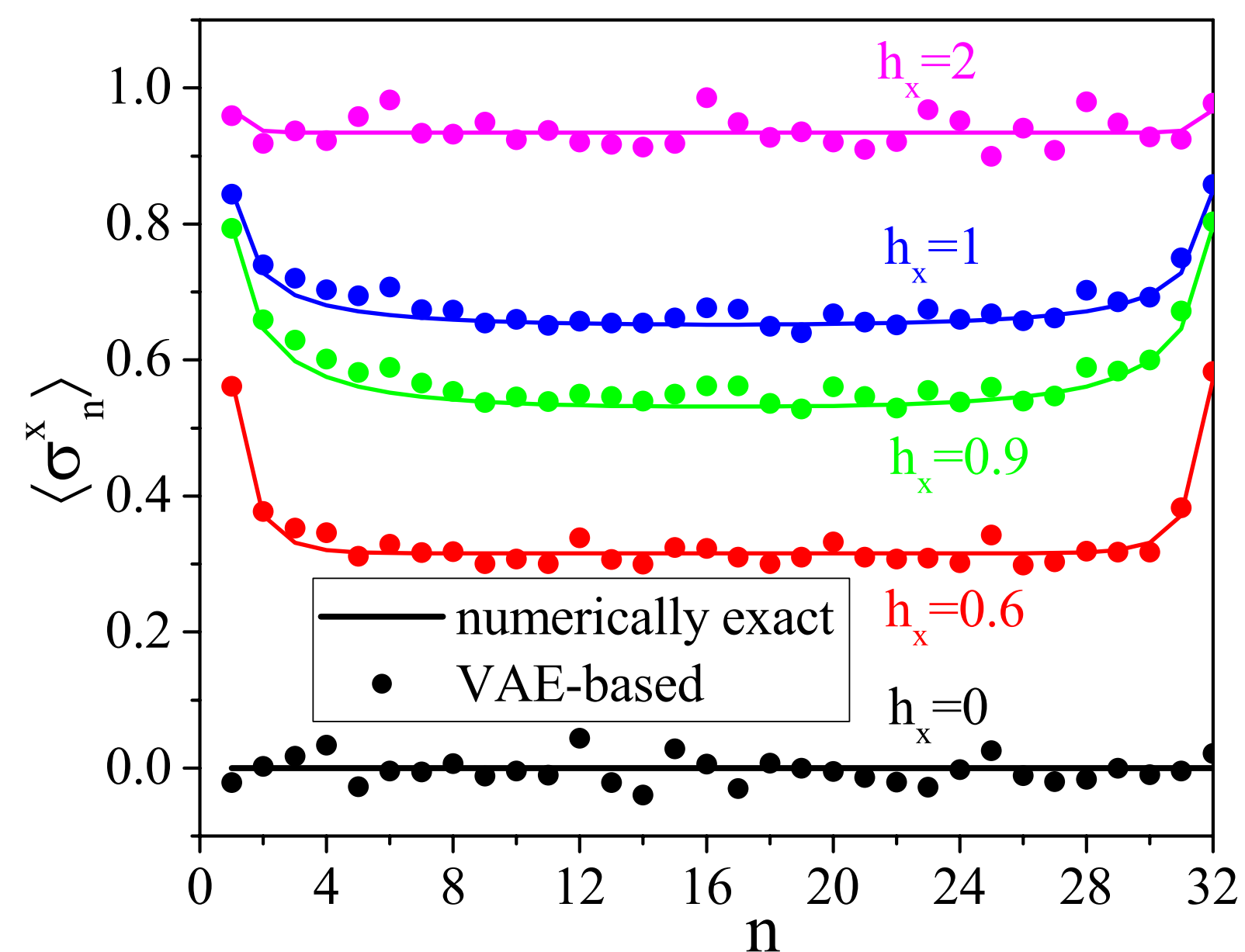
$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_z^i \sigma_z^{i+1} + h \sum_i \sigma_x^i$$



# Корреляционные функции

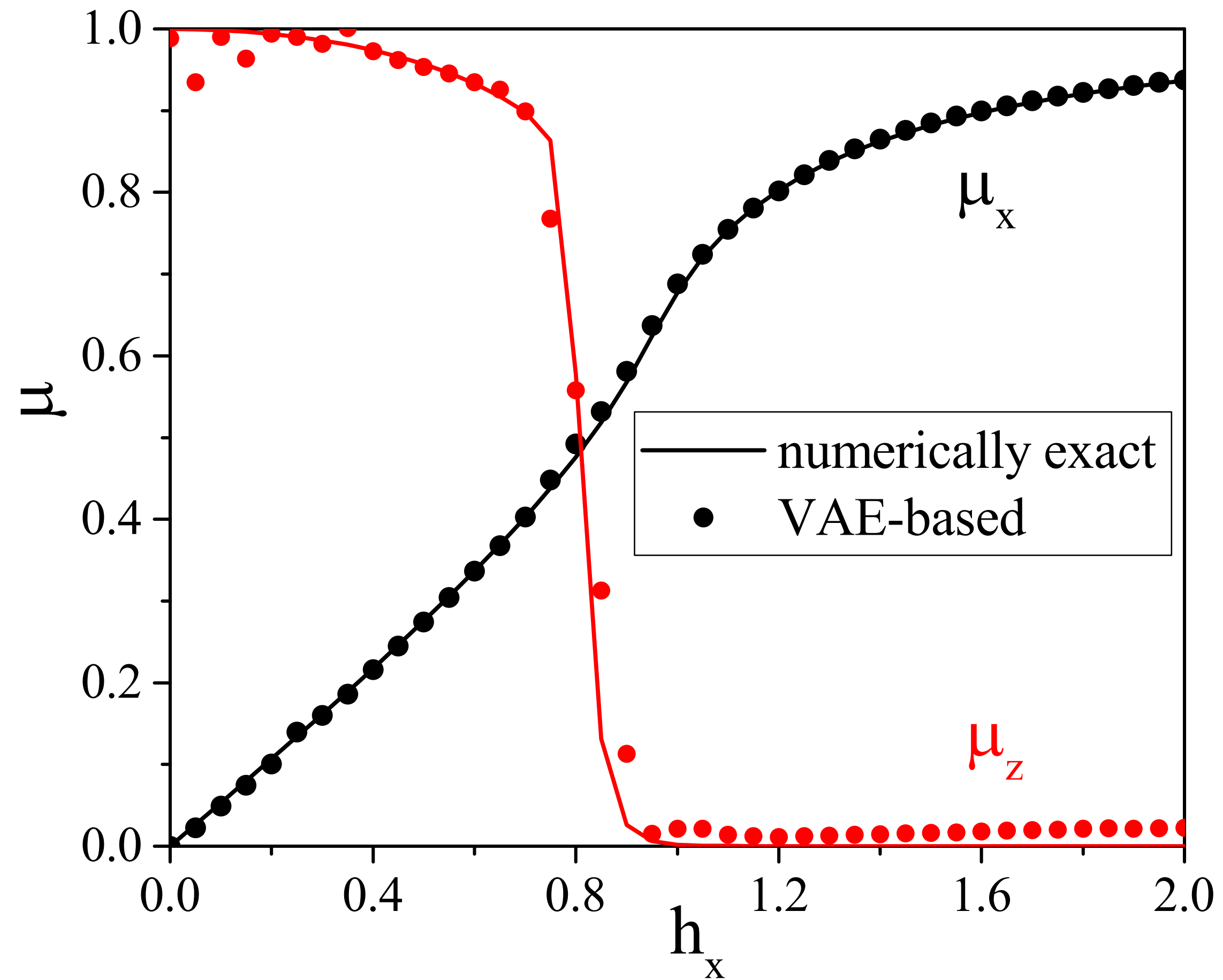


$\dim \mathcal{H} = 2^{32}$   
Объем выборки 500 000 для  
каждого значение магнитного  
поля  
21 значение магнитного поля  
в диапазоне от 0 до 2





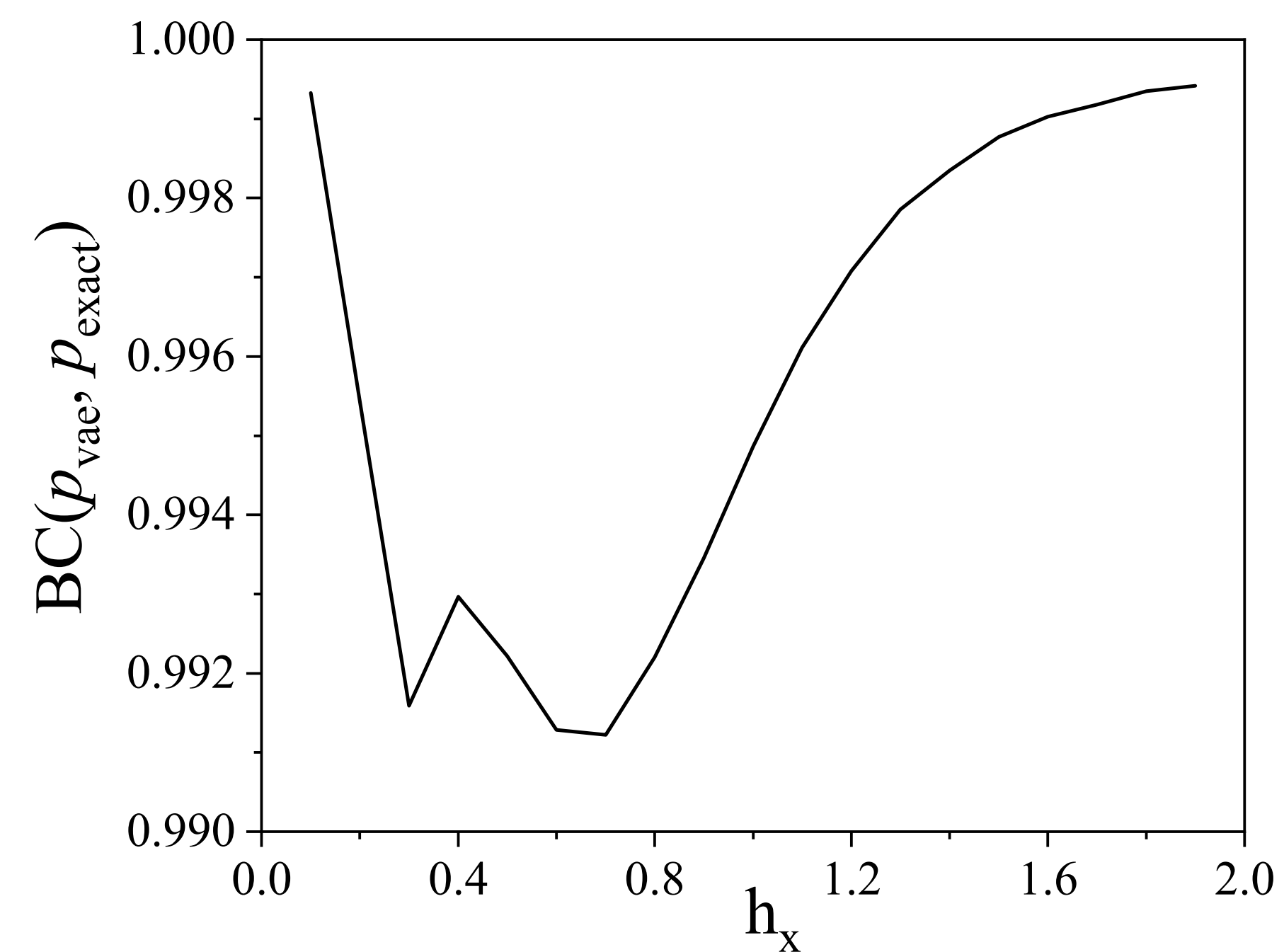
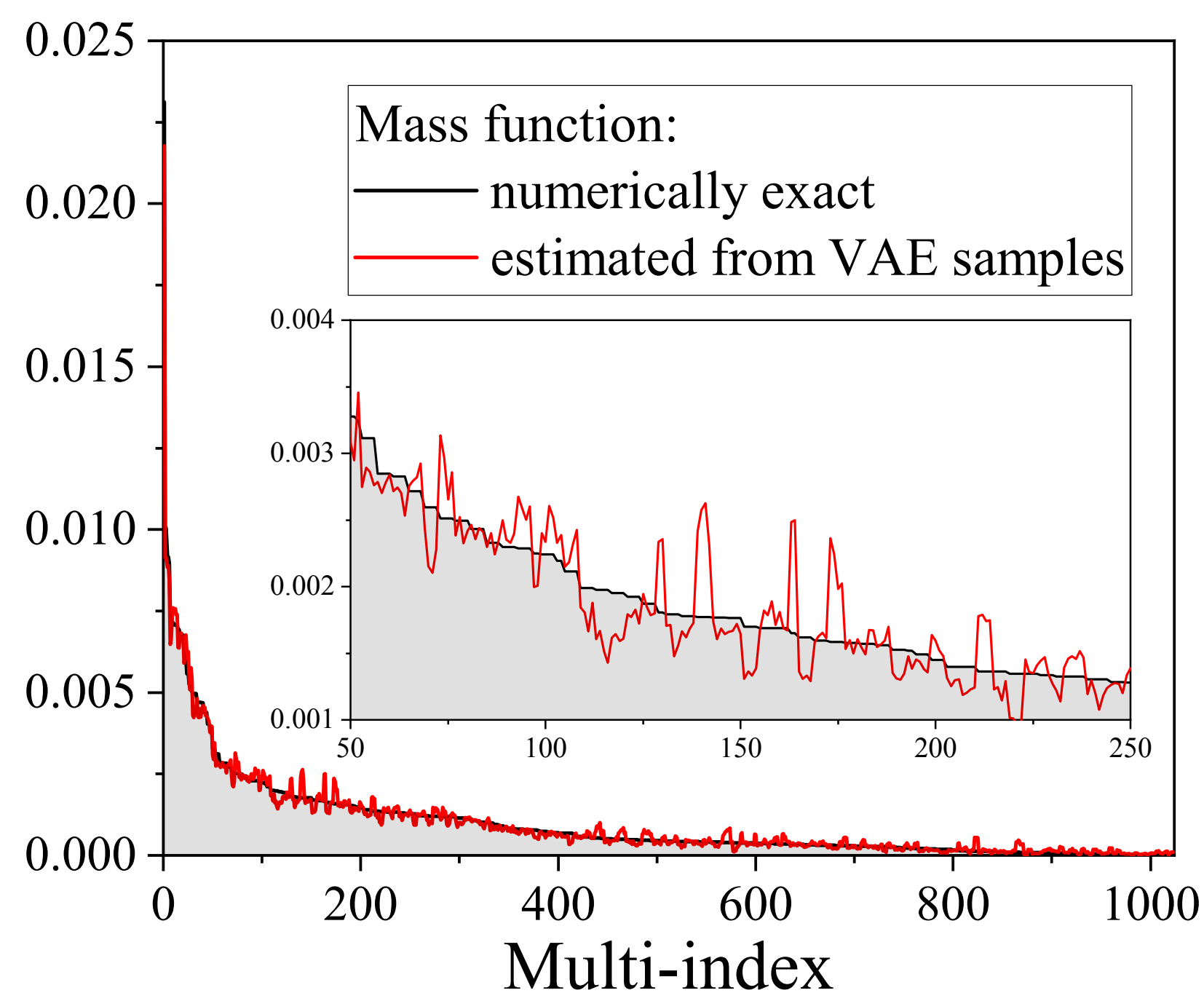
## Зависимость намагниченности от внешнего поля







## Точность описания для небольших цепочек



Luchnikov, I.A.; Ryzhov, A.; Stas, P.-J.; Filippov, S.N.; Ouerdane, H.  
Variational Autoencoder Reconstruction of Complex Many-Body  
Physics. *Entropy* **2019**, *21*, 1091.



## Четвертое положение, выносимое на защиту

Вариационный автокодировщик, обученный на конечном наборе исходов информационно полных измерений над многочастичной квантовой системой, позволяет генерировать неограниченно большую выборку исходов измерений, удовлетворяющих той же статистике, что и истинные результаты измерений. Сгенерированные вариационным автокодировщиком выборки позволяют рассчитать корреляционные функции многочастичной квантовой системы и средние значения локальных наблюдаемых.



# Выводы

- Предложена новая тензорная сеть, которая описывает действие окружения на квантовую систему, позволяющая строить сжатое представление окружения и оценивать его размерность
- Впервые предложен алгоритм восстановления Марковского вложения для немарковских квантовых систем по исходам последовательных измерений над системой, позволяющий предсказывать не только динамику немарковской квантовой системы, но и ее отклик на внешнее возмущение
- Введена концепция стробоскопического предела и описан новый тип квантовой динамики индуцированной измерениями
- Разработан и протестирован новый подход к восстановлению состояния многочастичной квантовой системы по исходам информационно полных измерений при помощи вариационного автокодировщика



**Спасибо за внимание!**