

神经网络通过测量数据刻画量子系统

吴亚东[†]

(上海交通大学约翰·霍普克罗夫特计算机科学中心 上海 200240)

2024-10-31 收到

[†] email: wuyadong301@sjtu.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20241105

CSTR: 32040.14.wl20241105

在日新月异的量子计算与量子信息领域，如何“读懂”量子系统内存储的量子信息成为科学家们关注的焦点。可以想象，想要准确了解一个复杂的量子系统，就像从拼图的碎片中复原一幅巨大的全景图。然而，量子系统的“全景图”因为其信息量的爆炸，往往超越了传统实验方法的能力。

1 量子系统表征及其神经网络算法

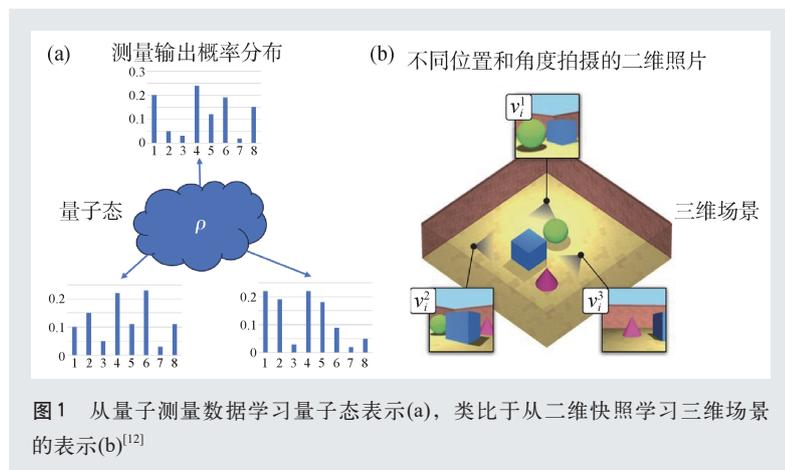
量子系统的表征就是在实验中通过测量获取对它们状态的描述。对于小规模量子系统，通常的方法是量子态层析，此过程类似于从低维投影重建高维物体的信息。但是，随着量子比特数的增加，完整表征任意一个未知量子态所需要的采样量指数增加，不仅实验耗费的时间过于漫长，得到的数据还可能“算不过来”。因此利用量子态层析来完整表征中型、大型规模量子系统几乎是不可能的。

神经网络为量子态的刻画与表征提供了强大的工具，能被用来紧凑地表示复杂结构的量子态^[1]。过去几年，各类神经网络模型不仅被用于

量子态层析^[2, 3]，即完整重建量子态波函数或密度矩阵的信息，也已被成功应用于通过测量来预测量子系统的多种物理性质，例如预测量子保真度和量子纠缠等重要物理量^[4, 5]，以及识别不同的量子物相^[6, 7]。近两年，随机测量成为实验表征量子系统的高效手段^[8]。在随机测量中，实验者对未知量子态执行多次量子测量，并且每次随机挑选不同的测量“视角”。这个过程类似于拍摄全景照片：人们随机选择从不同角度拍摄大量照片，再把它们拼接起来得到一幅完整的画面(图1)。随机测量已被成功应用于高效表征量子系统并预测量子系统的物理性质^[8-10]。

面对实验表征可拓展量子系统的挑战，我们提出了一系列神经网络算法，从量子态的随机采样的测量数据中学习该量子态的表示，并利用此表示预测未来测量的输出概率分布^[11]，或者预测两个量子态之间的近似度^[12]。前者的灵感来源于利用二维快照学习三维场景表征的神经网络算法^[13]，而后者类似于在经典机器学习中，通过模糊头像照片中的细微差别，判断是否为同一个人^[14]。有趣的是，这个学习过程并不依赖任何先验的物理知识，而完全由数据驱动，神经网络似乎在“模仿”人类物理学家，仅从实验观测数据中学习重建物理知识^[15]。

除此之外，近两年深度学习被广泛应用于预测量子系统的性质。例如，D. Koutny 等人^[5]利用神经网络算法通过不完整的测量数据预测量子纠缠的程度。又例如，Y. Qian 等人^[4]利用多模态神经网络算法整合量子测量信息和量子线路的信息，并预测不同平台量子线路输出态之间的保真度。再例如，H. X. Wang 等人^[16]利用条件



生成模型通过哈密顿量的参数来预测其对应基态的量子性质。

2 多任务神经网络算法

研究多体量子系统的一大难点在于，随着系统规模扩大，所需测量数量剧增。面对此困境，我们提出了多任务神经网络算法来学习和表征多体量子系统并预测其性质^[17]。多任务学习的原理和人类的大脑相似，可以“多线程”处理多项任务^[18]。例如，在语言处理中，模型可以同时进行翻译、对话和语义分析。而在量子系统中，多任务学习可以用少量的测量数据预测量子系统的多种特性。

通过这种方法，我们设计的神经网络模型利用相邻量子比特的测量数据预测量子态的全局特性(图2)。这种“短程关联”特性类似于在一排长队伍中传递信息：每个人仅与邻近的人交互。这样，量子系统的整体性质可以在不测量整体的情况下通过少数相邻粒子的局部信息推测出来。

研究结果表明，与传统的单任务学习模型相比，多任务学习模型对物理性质的预测准确度更高。数值模拟的结果表明，对于短程关联的量子态，多任务神经网络模型可以通过短程关联来预测全局性质，如序参量^[19]，并能够区分单任务网络无法区分的不同的对称保护拓扑相。针对耦合系数交替(J 与 J' 之间交替)变换的XXZ模型基态，神经网络的预测结果如图(3)所示。我们通过降维对神经网络生成的量子态表示进行了可视化，图中每个数据点代表一个不同哈密顿量参数的基态。结果表明，多任务网络能够有效聚类出拓扑相和平凡相(图3

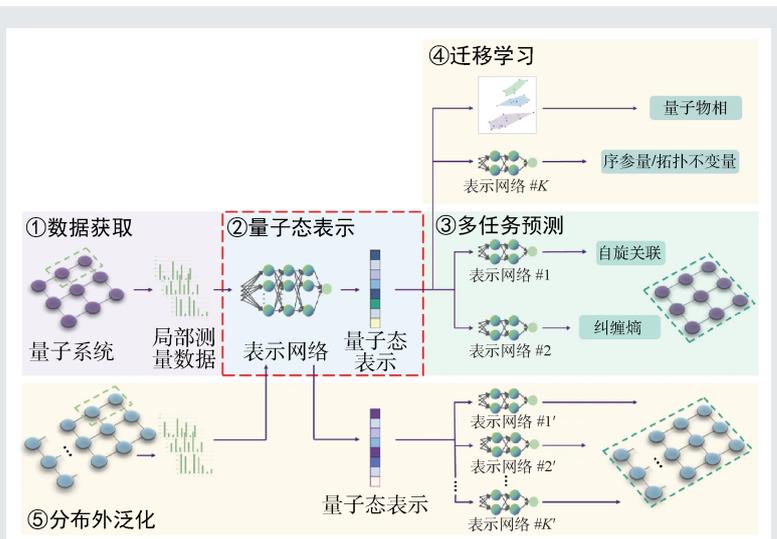


图2 多任务神经网络预测量子性质的流程图^[17]

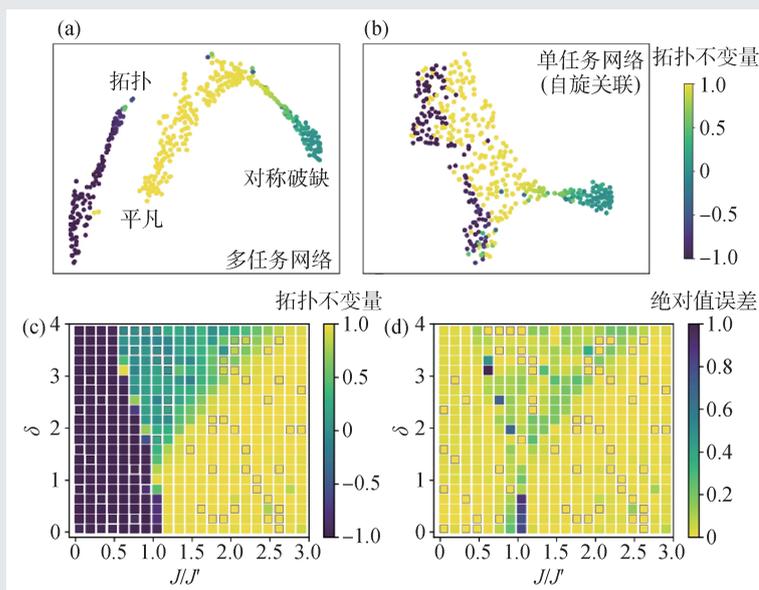


图3 键交替XXZ模型基态量子态表示的二维投影(由t-SNE算法得到)，以及神经网络对多体拓扑不变量的预测 (a)用于预测自旋关联和互信息的量子态表示；(b)用于预测自旋关联的量子态表示，其中每个数据点的颜色表示的是基态多体拓扑不变量的真实值；(c)神经网络对所有参数对应的基态多体拓扑不变量的预测值，并标出了60个基准态的真实值(灰色方块表示)；(d)预测值与真实值的绝对值误差，其中颜色越浅表示差异越小，颜色越深表示差异越大^[17]

(a))，而单任务网络则难以区分这两类相(图3(b))。此外，图3(c)展示了基于量子态表示对多体拓扑不变量的预测，而图3(d)展示了其与真实值的误差，预测精度仅在相变区域(图3(c)不同颜色交接处)有所下降，原因是相变附近量子态不再是短程关联。

该神经网络模型成功的关键特性是其能够生

成整合了多种物理性质信息的量子态表示,此过程类似于整合从不同位置和角度拍摄的照片,从而得到一个完整的画面。令人惊讶的是,这些量子态表示似乎还能捕捉到训练中未打标签的物理性质。这一特性使得该模型能够对不同物相进行无监督的分类,不仅适用于训练过的哈密顿量模型的基态,还可以实现分布外泛化,例如区分由随机量子线路生成的量子态所对应的拓扑相和平凡相。模型还展示出从小规模量子系统泛化到大规模量子系统的能力,这使得它成为探索中等规模量子系统的有效工具。该算法仅利用探测短程关联的随机泡利测量,显著减少了实验中所需的测量设置数量。在可测的泡利集合受限的情况下,

该算法在区分不同量子物相上的表现优于基于经典阴影的核主成分分析算法^[20]。

3 结语与展望

对于崭新的、真实相图仍然未知的量子系统,利用机器学习以无监督的方式发现相图将是一项重大的挑战。通过将神经网络算法与一致性检验相结合,或许可以解决这一难题。我们在这方面的系列研究不仅旨在通过机器学习工具实现更高效的量子系统表征与刻画,更希望推动量子信息科学与机器学习之间的学科交叉发展,带来新的视角和进展。

参考文献

- [1] Carleo G, Troyer M. *Science*, 2017, 355:602
- [2] Torlai G, Mazzola G, Carrasquilla J *et al.* *Nat. Phys.*, 2018, 14:447
- [3] Carrasquilla J, Torlai G, Melko R G *et al.* *Nat. Mach. Intell.*, 2019, 1:155
- [4] Qian Y, Du Y X, He Z L *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2024, 133:130601
- [5] Koutny D, Ginés L, Moczala-Dusanowska M *et al.* *Sci. Adv.*, 2023, 9:eadd7131
- [6] Carrasquilla J, Melko R G. *Nat. Phys.*, 2017, 13:431
- [7] Van Nieuwenburg E P, Liu Y H, Huber S D. *Nat. Phys.*, 2017, 13:435
- [8] Elben A, Flammia S T, Huang H Y *et al.* *Nat. Rev. Phys.*, 2023, 5:9
- [9] Huang H Y, Kueng R, Preskill J. *Nat. Phys.*, 2020, 16:1050
- [10] Elben A, Yu J L, Zhu G Y *et al.* *Sci. Adv.*, 2020, 6:eaa3666
- [11] Zhu Y, Wu Y D, Bai G *et al.* *Nat. Commun.*, 2022, 13:6222
- [12] Wu Y D, Zhu Y, Bai G *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2023, 130:210601
- [13] Eslami S A, Rezende D J, Besse F *et al.* *Science*, 2018, 360:1204
- [14] Schroff F, Kalenichenko D, Philbin J. Facenet: A unified embedding for face recognition and clustering. In: CVPR(2015), pp.815—823
- [15] Iten R, Metger T, Wilming H *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2020, 124:010508
- [16] Wang H X, Weber M, Izaac J *et al.* 2022, arXiv:2211.16943
- [17] Wu Y D, Zhu Y, Wang Y X, Chiribella G. *Nat. Commun.*, 2024, 15:8796
- [18] Zhang Y, Yang Q. *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.*, 2021, 34:5586
- [19] Pollmann F, Turner A M. *Phys. Rev. B*, 2012, 86:125441
- [20] Huang H Y, Kueng R, Torlai G *et al.* *Science*, 2022, 377:eabk3333

读者和编者

《物理》有奖征集 封面素材

为充分体现物理科学的独特之美,本刊编辑部欢迎广大读者和作者踊跃投寄与物理学相关的封面素材。要求图片清晰,色泽饱满,富有较强的视觉冲击力和很好的物理科学内涵。

一经选用,均有稿酬并赠阅该年度《物理》杂志。

请将封面素材以附件形式发至: physics@iphy.ac.cn; 联系电话: 010-82649029。

《物理》编辑部