

## 量子混合态的两种神经网络表示\*

杨莹<sup>1)</sup> 曹怀信<sup>2)†</sup>

1) (运城学院数学与信息技术学院, 运城 044000)

2) (陕西师范大学数学与统计学院, 西安 710119)

(2022 年 10 月 2 日收到; 2023 年 2 月 8 日收到修改稿)

量子信息与人工智能是近年来的两个前沿研究领域, 取得了诸多改变传统科学的进展, 实现这两个领域的交叉融合成为科学家关注的热点问题. 尽管学者们在这方面已进行了许多探索, 借助它们模拟开放多体量子系统的稳态和动力学性质, 但是量子混合态的神经网络的精确表示问题仍待研究. 本文致力于量子混合态的神经网络表示问题. 借助两种神经网络架构, 构建了具有一般输入可观测量的神经网络量子混合拟态 (NNQMVS) 与神经网络量子混合态 (NNQMS), 分别探讨了它们的性质, 得到了张量积运算、局部酉运算下 NNQMVS 与 NNQMS 的相关结论. 为了量化给定混合态分别由规范化的 NNQMVS 与 NNQMS 逼近的能力, 分别定义了它由规范化 NNQMVS 与 NNQMS 逼近的最佳逼近度, 给出了一般混合态能被规范化的 NNQMVS 与 NNQMS 表示的充要条件, 并探究了能用这两种神经网络架构表示的混合态的类型, 给出了相应的神经网络表示.

**关键词:** 神经网络, 量子混合态, 局域酉操作, 张量积**PACS:** 03.65.Aa, 03.65.Wj, 03.65.Ta, 03.65.Ud**DOI:** 10.7498/aps.72.20221905

## 1 引言

机器学习已成为一种应用广泛的强大工具<sup>[1]</sup>, 并在人工智能领域掀起革命, 围绕机器学习展开的一系列研发和应用正在为各个领域带来新的变化. 近年来, 研究者们发现了越来越多的基础物理学与人工智能之间的联系. 首先, 深度学习与物理系统存在本质上的对应关系; 其次, 机器学习是一种对复杂问题近似求解比传统数值模拟更有效的方法. 这种有效性让人们开始思考物理与机器学习更深层次的联系.

借用机器学习理论与思想攻击量子多体问题受到量子信息学家的高度关注<sup>[2,3]</sup>. 量子多体问题

的难点主要来源于 Hilbert 空间维数的指数增长. 为了克服该“指数墙”困难, 经常使用张量网络方法<sup>[4–6]</sup>和量子蒙特卡罗 (QMC) 模拟<sup>[7]</sup>. 然而, QMC 方法存在符号问题<sup>[8]</sup>; 张量网络方法很难处理高维系统<sup>[9]</sup>或具有复杂量子纠缠<sup>[10]</sup>的系统. 这些问题迫切需要寻求新的方法.

2017 年 2 月, Carleo 和 Troyer<sup>[11]</sup>首次将机器学习技术应用于求解量子多体问题, 他们借助受限玻尔兹曼机 (RBM) 为架构的神经网络模型打造了一款用来破解量子物理中最复杂难题的神经网络. Carleo 和 Troyer<sup>[11]</sup>考虑两个典型的自旋模型的基态问题, 即神经网络学习系统基态是什么? 他们惊奇地发现: 神经网络仅用较小的存储器就能得到基态, 完胜其他竞争技术; 还能通过增加

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12001480, 11871318, 12271325, 11971283)、山西省应用基础研究项目 (批准号: 201901D211461, 20210302123082)、山西省优秀博士来晋科研专项 (批准号: QZX-2020001) 和运城学院博士启动项目 (批准号: YQ-2019021) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: caohx@snnu.edu.cn

隐藏偏差和权重数量, 改善神经网络预测精度; 实验论证了机器学习方法远胜于其他数值模拟方法. 程嵩等<sup>[12]</sup>研究指出, 从量子纠缠的视角来审视深度学习, 或许有助于反过来理解和解决一些深度学习中的问题. 蔡子<sup>[13]</sup>介绍了近年来异常火热的人工神经网络方法和机器学习方法, 讨论了机器学习方法对于解决量子多体物理中“指数墙”困难的可能的潜在意义. 文献<sup>[2]</sup>总结了该交叉领域的研究进展和未来展望, 该文章认为目前学术界在量子机器学习领域主要涉及两方面的研究: 一方面是借助量子力学的相干叠加或者纠缠等特性, 实现优于经典算法的量子机器学习算法, 如量子版本的 PCA 和 SVM 算法, 以及能有效解决线性方程组求解的 HHL 算法等; 另一方面, 将难以解决的量子物理问题对应到经典人工智能算法, 提供有效的信息提取和分类, 这已在理论上成功用于研究相变、多体物理等问题, 但由于调控技术限制, 罕有实验方面的研究. 文献<sup>[14]</sup>提出一种全新的理论模型, 将量子力学中 Bell 不等式测量参数对应于人工智能网络, 成功简化了传统上被认为是一项资源消耗度较高的量子态分类问题, 只需少量投影测量即可判定量子态的纠缠性质. 文献<sup>[15]</sup>首次从实验上演示了机器学习算法用于解决量子信息难题, 标志着机器学习与量子信息的深度交叉, 向发展各种衍生技术迈出了重要一步. 文献<sup>[16]</sup>介绍了如何利用量子神经网络技术来检测纠缠, 他们分别应用离散变量和连续变量量子神经网络模型求解可分性问题, 证明了这种深度量子神经网络的能力和适应性. Deng 等<sup>[17]</sup>发现某些拓扑状量子态可以用人工神经网络来表示. 随后, 他对神经网络量子态中的量子纠缠特性进行了研究<sup>[18]</sup>, 并在文献<sup>[19]</sup>中采用机器学习技术探测量子多体系统中的 Bell 非局域性. Gao 等<sup>[20]</sup>证明了深层神经网络可以有效地表示大多数量子态, 而 RBM 可以有效地表示一类具有奇异拓扑顺序的多体纠缠态<sup>[21]</sup>, 还提出了量子生成模型<sup>[22]</sup>, 这是量子学习算法理论方面的一个突破. Carleo 等<sup>[23]</sup>提出了表示一类多体晶格哈密顿量精确基态的人工神经网络. Glasserz 和 Pancotti<sup>[24]</sup>证明了 RBM 神经网络量子态与某些张量网络态间存在着联系. Jia 等<sup>[25]</sup>阐述了神经网络量子态的方法与应用. 文献<sup>[26]</sup>在超导系统中首次实验实现了量子生成对抗学习, 展示了量子器件在人工智能领域中的可行性及巨大潜力. 文献<sup>[27]</sup>从数学角度构建了具有一般输入的神经网络量子纯态, 并探讨了其相关

性质以及表示问题, 给出了某些  $N$  比特态的神经网络表示. 机器学习和量子物理之间的相互作用也将促进了这两个领域的快速发展<sup>[28–34]</sup>. 在很多学者的努力下, 神经网络量子纯态被推广到混合态. 文献<sup>[35]</sup>参数化了一个基于受限玻尔兹曼机的密度矩阵, 并使用它对纠缠光子的一些典型态进行断层扫描. 文献<sup>[36]</sup>采用神经网络表示了多体量子混合态, 并推导了它们的时间演化和稳态的变分蒙特卡罗算法, 用一个耗散自旋晶格系统的数值例子证明了该方法的准确性. 文献<sup>[37]</sup>提出了一种通过神经网络变分方法来确定开放量子晶格系统的稳态. 文献<sup>[38]</sup>提出了一种基于神经网络的变分方法来有效模拟开放量子系统的非平衡稳态. 文献<sup>[39]</sup>提出了一种基于神经网络量子态的方案来模拟开放量子多体系统的稳态. 尽管有了上述令人兴奋的成果, 但是很少有人关注神经网络的精确表示问题. 对这个问题的研究将有助于机器学习技术在量子物理中的应用. 相反, 这个研究也可能为理解某些机器学习算法为何如此强大提供有价值的见解.

本文重点探讨量子混合态的神经网络表示问题. 首先构建具有一般输入可观测量的神经网络量子混合拟态 (NNQMVS) 与神经网络量子混合态 (NNQMS). 然后, 探讨它们的相关性质, 如张量积、局部酉运算等. 最后, 为了量化给定混合态由规范化 NNQMVS 与 NNQMS 逼近的程度, 定义  $\rho$  由规范化 NNQMVS 与 NNQMS 逼近的最佳逼近度, 给出一般量子混合态能被规范化 NNQMVS 与 NNQMS 表示的充要条件, 并探究一些特殊混合态的神经网络表示.

## 2 神经网络量子混合拟态

设  $Q_1, Q_2, \dots, Q_N$  为  $N$  个量子系统, 它们的态空间分别为  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots, \mathcal{H}_N$ , 维数分别为  $d_1, d_2, \dots, d_N$ . 考虑  $Q_1, Q_2, \dots, Q_N$  的复合系统  $Q$ , 其态空间为  $\mathcal{H} := \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ . 本文用  $z^*$  表示复数  $z$  的共轭, 用  $\mathbb{C}^{M \times N}$  表示全体  $M \times N$  复矩阵之集.

假设  $S_1, S_2, \dots, S_N$  分别为系统  $Q_1, Q_2, \dots, Q_N$  上的非退化可观测量, 易知  $S = S_1 \otimes S_2 \otimes \dots \otimes S_N$  为复合系统  $Q$  上的可观测量, 显然它是  $\mathcal{H}$  上的自伴算子. 若自伴算子  $S_j$  的特征值与特征基分别为  $\{\lambda_{k_j}\}_{k_j=0}^{d_j-1}$ ,  $\{|\psi_{k_j}\rangle\}_{k_j=0}^{d_j-1}$ , 则  $S_j|\psi_{k_j}\rangle = \lambda_{k_j}|\psi_{k_j}\rangle$  ( $k_j = 0, 1, 2, \dots, d_j - 1$ ). 易知  $S = S_1 \otimes S_2 \otimes \dots \otimes S_N$  的特征值与特征基分别为

$$\lambda_{k_1} \lambda_{k_2} \cdots \lambda_{k_N}, |\psi_{k_1}\rangle \otimes |\psi_{k_2}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{k_N}\rangle,$$

其中  $k_j = 0, 1, 2, \dots, d_j - 1$ . 记:

$$V(S, S) = \{A_{k_1 k_2 \cdots k_N, k'_1 k'_2 \cdots k'_N} \equiv (\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N})^T : k_j, k'_j = 0, 1, 2, \dots, d_j - 1\},$$

称为输入空间. 对于参数

$$a = (a^1, a^2)^T = (a^1_1, a^1_2, \dots, a^1_N, a^2_1, a^2_2, \dots, a^2_N)^T \in \mathbb{C}^{2N}, \quad b = (b_1, b_2, \dots, b_M)^T \in \mathbb{C}^M,$$

$$W = (W^1 \quad W^2) \in \mathbb{C}^{M \times 2N}, \quad W^1 \in \mathbb{C}^{M \times N}, \quad W^2 \in \mathbb{C}^{M \times N},$$

记  $\Omega = (a, b, W)$  并定义

$$\begin{aligned} & \rho_{S, \Omega}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N}) \\ &= \sum_{h_i = \pm 1} \exp \left( \sum_{j=1}^N a_j^1 \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^N a_j^2 \lambda_{k'_j} + \sum_{i=1}^M b_i h_i + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N W_{ij}^1 h_i \lambda_{k_j} + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N W_{ij}^2 h_i \lambda_{k'_j} \right). \end{aligned} \quad (1)$$

显然,  $\rho_{S, \Omega}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N})$  是输入变量为  $A_{k_1 k_2 \cdots k_N, k'_1 k'_2 \cdots k'_N}$  的复值函数, 称为神经网络量子波函数 (NNQWF). 进而定义:

$$\rho_{S, \Omega} = \sum_{A_{k_1 \cdots k_N, k'_1 \cdots k'_N} \in V(S, S)} \rho_{S, \Omega}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_N}) |\psi_{k_1}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{k_N}\rangle \langle \psi_{k'_1}| \otimes \cdots \otimes \langle \psi_{k'_N}|, \quad (2)$$

它是 Hilbert 空间  $\mathcal{H}$  上的算子. 一般地, 算子  $\rho_{S, \Omega}$  未必是半正定的、未必迹为 1. 那么当它非半正定时, 令  $\rho_{S, \Omega}^{(n)} = \sqrt{\rho_{S, \Omega}^\dagger \rho_{S, \Omega}}$ , 则  $\rho_{S, \Omega}^{(n)}$  为半正定算子. 显然, 当  $\rho_{S, \Omega} \geq 0$  时, 有  $\rho_{S, \Omega}^{(n)} = \rho_{S, \Omega}$ . 称算子  $\rho_{S, \Omega}$  为由参数  $\Omega = (a, b, W)$  和输入可观测量  $S$  诱导的神经网络量子混合拟态 (NNQMVS), 它可由一个具有  $2N$  个可视人工神经元 (蓝色圆盘) 和  $M$  个隐藏神经元 (黄色圆盘) 的受限制的玻尔兹曼机 (见图 1) 生成或表示.

借助内积运算可得:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N a_j^1 \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^N a_j^2 \lambda_{k'_j} + \sum_{i=1}^M b_i h_i + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N W_{ij}^1 h_i \lambda_{k_j} + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N W_{ij}^2 h_i \lambda_{k'_j} \\ &= \langle A_{k_1 k_2 \cdots k_N, k'_1 k'_2 \cdots k'_N}, a \rangle + \langle h, b + W A_{k_1 k_2 \cdots k_N, k'_1 k'_2 \cdots k'_N} \rangle, \end{aligned}$$

其中  $h = (h_1, h_2, \dots, h_M)^T$ . 于是, (1) 式具有下列紧凑的形式:

$$\rho_{S, \Omega}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N}) = e^{\langle A_{k_1 k_2 \cdots k_N, k'_1 k'_2 \cdots k'_N}, a \rangle} \sum_{h_i = \pm 1} e^{\langle h, b + W A_{k_1 k_2 \cdots k_N, k'_1 k'_2 \cdots k'_N} \rangle}.$$

下面给出 (1) 式的另一种形式. 首先, 计算可得

$$e^{\langle A_{k_1 k_2 \cdots k_N, k'_1 k'_2 \cdots k'_N}, a \rangle} = e^{\sum_{j=1}^N a_j^1 \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^N a_j^2 \lambda_{k'_j}} = \prod_{j=1}^N e^{a_j^1 \lambda_{k_j} + a_j^2 \lambda_{k'_j}}.$$

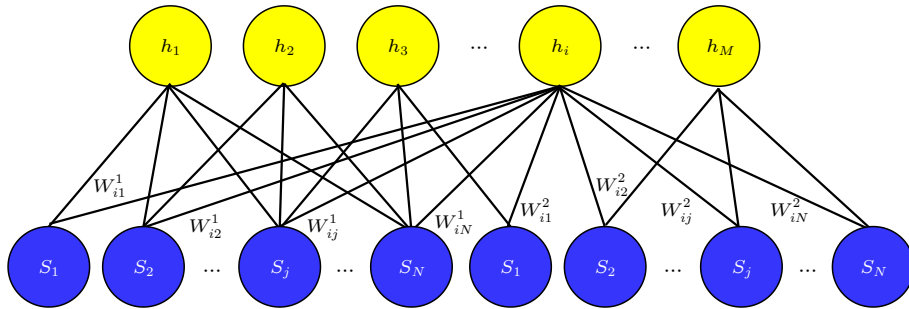


图 1 NNQMVS 相匹配的人工神经网络

Fig. 1. Artificial neural network encoding an NNQMVS.

令  $x_i = b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij}^1 \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^N W_{ij}^2 \lambda_{k'_j}$ , 则

$$\sum_{h_i=\pm 1} e^{\langle h_i, b_i + W_{i1} \lambda_{k_1} \dots \lambda_{k_N}, h'_1 \lambda'_{k'_1} \dots h'_N \lambda'_{k'_N} \rangle} = \sum_{h_i=\pm 1} e^{\sum_{i=1}^M h_i \left( b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij}^1 \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^N W_{ij}^2 \lambda_{k'_j} \right)} = \sum_{h_i=\pm 1} \prod_{i=1}^M e^{x_i h_i} = \prod_{i=1}^M 2 \cosh(x_i).$$

于是, NNQWF 可以简化为

$$\rho_{S,\Omega}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N}) = \prod_{j=1}^N e^{a_j^1 \lambda_{k_j} + a_j^2 \lambda_{k'_j}} \cdot \prod_{i=1}^M 2 \cosh \left( b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij}^1 \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^N W_{ij}^2 \lambda_{k'_j} \right). \quad (3)$$

神经网络量子混合拟态可以用下面的“量子人工神经网络”来描述, 见图 2, 其中  $a = 0$ ,  $2 \cosh(z) = e^z + e^{-z}$ ,  $\sum_{b_i}$  为求和函数,  $\prod$  为求积函数:

$$\sum_{b_i} (x_1, x_2, \dots, x_N, x'_1, x'_2, \dots, x'_N) = b_i + \sum_{j=1}^N x_j + \sum_{j=1}^N x'_j,$$

$$\prod (y_1, y_2, \dots, y_M) = \prod_{i=1}^M y_i,$$

且最终输出结果由 (3) 式给出.

因为这个网络输入的是量子可观测量的特征值, 输出的是 NNQWF 的值, 且网络结构与通常的人工神经网络非常相似, 将此网络称为 NNQMVS 对应的量子人工神经网络.

下面给出几类特殊的 NNQMVS.

**情形 1** 当  $S = \sigma_1^z \otimes \sigma_2^z \otimes \dots \otimes \sigma_N^z$  时, 有

$$\lambda_{k_j} = \begin{cases} 1, & k_j = 0 \\ -1, & k_j = 1 \end{cases}, \quad |\psi_{k_j}\rangle = \begin{cases} |0\rangle, & k_j = 0 \\ |1\rangle, & k_j = 1 \end{cases} \quad (1 \leq j \leq N),$$

此时,  $V(S, S) = \{1, -1\}^{2N}$ .

此情形下, NNQMVS (2) 式变为

$$\rho_{S,\Omega} = \sum_{\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_N} \in \{1, -1\}^{2N}} \rho_{S,\Omega}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_N}) |\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_N}\rangle \langle \psi_{k'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \psi_{k'_N}|,$$

将这种 NNQMVS 称为自旋  $z$  NNQMVS.

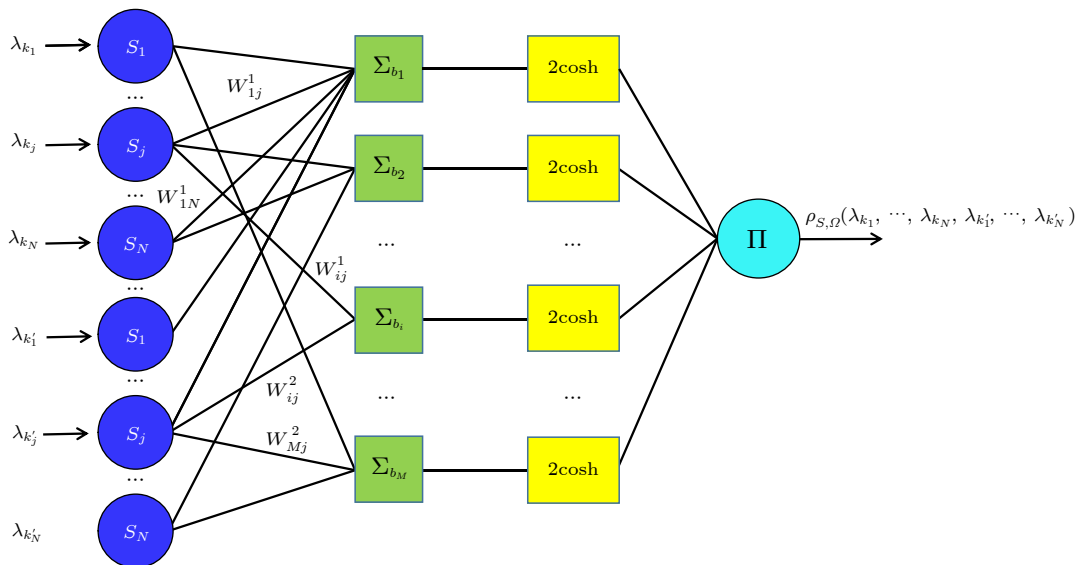


图 2 含参数  $\Omega = (0, b, W)$  的 NNQMVS 对应的量子人工神经网络

Fig. 2. Quantum artificial neural network of NNQMVS with parameter  $\Omega = (0, b, W)$ .

### 情形 2 神经网络量子纯态.

当下列情形 1) 或 2) 之一成立时,  $\rho_{S,\Omega}$  为神经网络量子纯态.

1)  $M = 2M'$ . 此时, 令

$$a^2 = (a^1)^*, b_i = (b_{i-M'})^* (i = M'+1, M'+2, \dots, M),$$

$$W_{ij}^1 = 0 (i = M'+1, M'+2, \dots, M; j = 1, 2, \dots, N),$$

$$W_{ij}^2 = 0 (i = 1, 2, \dots, M'; i = 1, 2, \dots, N),$$

$$W_{ij}^2 = (W_{(i-M')j}^1)^* (i = M'+1, M'+2, \dots, M; j = 1, 2, \dots, N),$$

则  $\rho_{S,\Omega} = |\psi\rangle\langle\psi|$ , 其中

$$|\psi\rangle = \prod_{j=1}^N e^{a_j^1 \lambda_{k_j}} \cdot \prod_{i=1}^{M'} 2 \cosh \left( b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij}^1 \lambda_{k_j} \right) \times |\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_N}\rangle.$$

可见,  $\rho_{S,\Omega}$  为神经网络量子纯态 [27].

2)  $M' \leq M/2$ . 此时, 令  $a^2 = (a^1)^*$ ,

$$b_i = (b_{i-(M-M')})^* (i = M-M'+1, M-M'+2, \dots, M),$$

$$b_i = \frac{\pi i}{3} (i = M'+1, M'+2, \dots, M-M'),$$

$$W_{ij}^1 = 0 (i = M'+1, M'+2, \dots, M; j = 1, 2, \dots, N),$$

$$W_{ij}^2 = 0 (i = 1, 2, \dots, M-M'; j = 1, 2, \dots, N),$$

$$W_{ij}^2 = (W_{(i-(M-M'))j}^1)^* (i = M-M'+1, \dots, M; j = 1, 2, \dots, N),$$

则  $\rho_{S,\Omega} = |\psi\rangle\langle\psi|$ , 其中

$$|\psi\rangle = \prod_{j=1}^N e^{a_j^1 \lambda_{k_j}} \cdot \prod_{i=1}^{M'} 2 \cosh \left( b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij}^1 \lambda_{k_j} \right) \times |\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_N}\rangle.$$

此时,  $\rho_{S,\Omega}$  也为神经网络量子纯态 [27].

容易看出,  $|\psi\rangle$  是文献 [27] 给出的神经网络量子纯态的形式, 当网络参数取值特殊的时候, 神经网络量子混合拟态就变成了神经网络量子纯态, 这也说明神经网络量子混合拟态是神经网络量子纯态的推广. 虽然这里构造的 NNQMVS 未必是半正定的矩阵, 但是, 当参数选取特殊时, 可以成为半正定矩阵. 因此, 这样的构建具有一定的合理性.

### 情形 3 特别地, 令

$$a^2 = (a^1)^*, b_i = (b_i)^* (i = 1, 2, \dots, M),$$

$$W^2 = (W^1)^*, \quad (4)$$

则  $\rho_{S,\Omega}$  是自伴的, 将这种 NNQMVS 称为对偶的 NNQMVS.

令

$$a^2 = (a^1)^*, b_i = -(b_i)^* (i = 1, 2, \dots, M),$$

$$W^2 = -(W^1)^*, \quad (5)$$

则  $\rho_{S,\Omega}$  也是自伴的, 将这种 NNQMVS 称为反对偶的 NNQMVS.

下面探讨神经网络量子混合拟态的性质. 由神经网络量子混合拟态的定义, 可以得到下面的事实.

**注 1** 当  $M' > M$  时, 对给定参数  $\Omega = (a, b, W)$  且  $a \in \mathbb{C}^{2N}, b \in \mathbb{C}^M, W \in \mathbb{C}^{M \times 2N}$ , 定义:

$$\hat{b} = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{3} \\ \frac{\pi i}{3} \\ \vdots \\ \frac{\pi i}{3} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{M'-M}, b' = \begin{pmatrix} b \\ \hat{b} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{M'},$$

$$W' = \begin{pmatrix} W \\ \hat{W} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W^1 & W^2 \\ \hat{W}^1 & \hat{W}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W^1 & W^2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= (W'^1 \quad W'^2) \in \mathbb{C}^{M' \times 2N}.$$

于是可得到一个新的参数  $\Omega' = (a, b', W')$ , 满足:

$$b'_i = b_i (i = 1, 2, \dots, M),$$

$$b'_i = \frac{\pi i}{3} (i = M+1, N+2, \dots, M'),$$

$$W'_{ij} = W_{ij} (1 \leq i \leq M, 1 \leq j \leq 2N),$$

$$W'_{ij} = 0 (i = M+1, M+2, \dots, M'; j = 1, 2, \dots, 2N).$$

容易看出: 当  $i = M+1, N+2, \dots, M'$  时, 有

$$2 \cosh \left( b'_i + \sum_{j=1}^N \hat{W}_{ij}^1 \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^N \hat{W}_{ij}^2 \lambda_{k'_j} \right) = 2 \cosh \frac{\pi i}{3} = 1.$$

从而

$$\prod_{i=1}^{M'} 2 \cosh \left( b'_i + \sum_{j=1}^N W'_{ij}{}^1 \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^N W'_{ij}{}^2 \lambda_{k'_j} \right)$$

$$= \prod_{i=1}^M 2 \cosh \left( b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij}^1 \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^N W_{ij}^2 \lambda_{k'_j} \right).$$



这表明

$$\begin{aligned} & \rho_{S,\Omega'}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N}) \\ &= \rho_{S,\Omega}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N}). \end{aligned}$$

于是, 参数  $\Omega'$  与  $\Omega$  定义了相同的 NNQMVS.

由此可见, 在一个已有的神经网络上增加隐层神经元的个数, 并适当的选取增加的网络参数, 得到的新的 NNQMVS 和之前的 NNQMVS 是一样的. 进一步可知, 神经网络量子混合拟态相匹配的人工神经网络不唯一.

于是, 可以得到下面的结论.

**命题 1** 神经网络量子混合拟态相匹配的人工神经网络不唯一.

探讨 NNQMVS 的张量积, 可以得到如下的结论.

**命题 2** 如果  $\rho'_{S',\Omega'}$  和  $\rho''_{S'',\Omega''}$  都是 NNQMVS, 参数分别为

$$\begin{cases} S' = S'_1 \otimes \dots \otimes S'_{N'}, & \Omega' = (a', b', W'), \\ S'' = S''_1 \otimes \dots \otimes S''_{N''}, & \Omega'' = (a'', b'', W''). \end{cases}$$

那么  $\rho'_{S',\Omega'} \otimes \rho''_{S'',\Omega''}$  也是一个 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega}$ , 其参数为

$$\begin{aligned} S &= S' \otimes S'', \quad N = N' + N'', \\ M &= M' + M'', \quad \Omega = (a, b, W), \end{aligned}$$

$$a = \begin{pmatrix} a^1 \\ a^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a'^1 \\ a''^1 \\ a'^2 \\ a''^2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b' \\ b'' \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} W &= \begin{pmatrix} W'^1_{M' \times N'} & 0 & W'^2_{M' \times N'} & 0 \\ 0 & W''^1_{M'' \times N''} & 0 & W''^2_{M'' \times N''} \end{pmatrix} \\ &= (W^1 \quad W^2). \end{aligned}$$

**证明** 因为  $\rho'_{S',\Omega'}$  和  $\rho''_{S'',\Omega''}$  都为 NNQMVS, 所以:

$$\begin{aligned} \rho'_{S',\Omega'} &= \sum_{\Lambda_{k_1 \dots k_{N'}, k'_1 \dots k'_{N'}} \in V(S', S')} \rho'_{S',\Omega'}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_{N'}}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}) |\psi_{k_1}\rangle \\ &\quad \otimes |\psi_{k_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_{N'}}\rangle \langle \psi_{k'_1}| \otimes \langle \psi_{k'_2}| \otimes \dots \otimes \langle \psi_{k'_{N'}}|, \\ \rho''_{S'',\Omega''} &= \sum_{\Lambda_{m_1 \dots m_{N''}, m'_1 \dots m'_{N''}} \in V(S'', S'')} \rho''_{S'',\Omega''}(\mu_{m_1}, \dots, \mu_{m_{N''}}, \mu_{m'_1}, \dots, \mu_{m'_{N''}}) |\phi_{m_1}\rangle \\ &\quad \otimes |\phi_{m_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{m_{N''}}\rangle \langle \phi_{m'_1}| \otimes \langle \phi_{m'_2}| \otimes \dots \otimes \langle \phi_{m'_{N''}}|. \end{aligned}$$

令  $S = S' \otimes S'', N = N' + N'', M = M' + M'', \Omega = (a, b, W)$ ,

其中

$$a = \begin{pmatrix} a^1 \\ a^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a'^1 \\ a''^1 \\ a'^2 \\ a''^2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b' \\ b'' \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} W'^1_{M' \times N'} & 0 & W'^2_{M' \times N'} & 0 \\ 0 & W''^1_{M'' \times N''} & 0 & W''^2_{M'' \times N''} \end{pmatrix} = (W^1 \quad W^2),$$

$$(\xi_{l_1}, \xi_{l_2}, \dots, \xi_{l_N}, \xi_{l'_1}, \xi_{l'_2}, \dots, \xi_{l'_N}) = (\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_{N'}}, \mu_{m_1}, \dots, \mu_{m_{N''}}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}, \mu_{m'_1}, \dots, \mu_{m'_{N''}}),$$

则

$$\begin{aligned} & \rho'_{S',\Omega'}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_{N'}}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}) \cdot \rho''_{S'',\Omega''}(\mu_{m_1}, \mu_{m_2}, \dots, \mu_{m_{N''}}, \mu_{m'_1}, \mu_{m'_2}, \dots, \mu_{m'_{N''}}) \\ &= \prod_{j=1}^{N'} e^{a'^1_j \lambda_{k_j} + a'^2_j \lambda_{k'_j}} \cdot \prod_{i=1}^{M'} 2 \cosh \left( b'_i + \sum_{j=1}^{N'} W'^1_{ij} \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^{N'} W'^2_{ij} \lambda_{k'_j} \right) \cdot \prod_{j=1}^{N''} e^{a''^1_j \mu_{m_j} + a''^2_j \mu_{m'_j}} \\ &\quad \times \prod_{i=1}^{M''} 2 \cosh \left( b''_i + \sum_{j=1}^{N''} W''^1_{ij} \mu_{m_j} + \sum_{j=1}^{N''} W''^2_{ij} \mu_{m'_j} \right) \\ &= \left( \prod_{j=1}^N e^{a^1_j \xi_{l_j} + a^2_j \xi_{l'_j}} \right) \cdot \left( \prod_{i=1}^M 2 \cosh \left( b_i + \sum_{j=1}^N W^1_{ij} \xi_{l_j} + \sum_{j=1}^N W^2_{ij} \xi_{l'_j} \right) \right) = \rho_{S,\Omega}(\xi_{l_1}, \xi_{l_2}, \dots, \xi_{l_N}, \xi_{l'_1}, \xi_{l'_2}, \dots, \xi_{l'_N}), \end{aligned}$$

再令

$$|\xi_{l_i}\rangle = \begin{cases} |\psi_{k_i}\rangle, & i \in \{1, 2, \dots, N'\} \\ |\phi_{m_{i-N'}}\rangle, & i \in \{N'+1, N'+2, \dots, N\} \end{cases}$$

可得

$$\begin{aligned} & \rho'_{S',\Omega'} \otimes \rho''_{S'',\Omega''} \\ &= \sum_{\Lambda_{k_1 \dots k_{N'}, k'_1 \dots k'_{N'}} \in V(S', S')} \rho'_{S',\Omega'}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_{N'}}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}) \\ & \quad \times \sum_{\Lambda_{m_1 \dots m_{N''}, m'_1 \dots m'_{N''}} \in V(S'', S'')} \rho''_{S'',\Omega''}(\mu_{m_1}, \dots, \mu_{m_{N''}}, \mu_{m'_1}, \dots, \mu_{m'_{N''}}) |\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \\ & \quad \otimes |\psi_{k_{N'}}\rangle \otimes |\phi_{m_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{m_{N''}}\rangle \langle \psi_{k'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \psi_{k'_{N'}}| \otimes \langle \phi_{m'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \phi_{m'_{N''}}| \\ &= \sum_{\Lambda_{l_1 \dots l_N, l'_1 \dots l'_N} \in V(S, S)} \rho_{S,\Omega}(\xi_{l_1}, \dots, \xi_{l_N}, \xi_{l'_1}, \dots, \xi_{l'_N}) |\varphi_{l_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{l_N}\rangle \langle \varphi_{l_1}| \otimes \dots \otimes \langle \varphi_{l_N}| = \rho_{S,\Omega}, \end{aligned}$$

于是, 两个NNQMVS的张量积也是一个NNQMVS.

下面讨论局部酉操作对NNQMVS的影响, 可得结论如下.

**命题 3** 若  $\rho_{S,\Omega}$  是一个 NNQMVS,  $U = U_1 \otimes U_2 \otimes \dots \otimes U_N$  是  $\mathcal{H}$  上的局域酉算子, 则  $U\rho_{S,\Omega}U^\dagger = \rho_{USU^\dagger,\Omega}$ , 即  $U\rho_{S,\Omega}U^\dagger$  也是一个 NNQMVS, 其输入可观测量为  $USU^\dagger$ 、参数为  $\Omega$ , 且与  $\rho_{S,\Omega}$  有相同的波函数.

**证明** 因为  $\rho_{S,\Omega}$  是一个 NNQMVS 且  $U$  是  $\mathcal{H}$  上的局域酉算子, 计算可得:

$$\begin{aligned} U\rho_{S,\Omega}U^\dagger &= \sum_{\Lambda_{k_1 k_2 \dots k_N, k'_1 k'_2 \dots k'_N} \in V(S, S)} \rho_{S,\Omega}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N}) |U_1\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \\ & \quad \otimes |U_N\psi_{k_N}\rangle \langle U_1\psi_{k'_1}| \otimes \dots \otimes \langle U_N\psi_{k'_N}| = \sum_{\Lambda_{k_1 k_2 \dots k_N, k'_1 k'_2 \dots k'_N} \in V(USU^\dagger, USU^\dagger)} \rho_{USU^\dagger,\Omega}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \\ & \quad \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N}) |\phi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{k_N}\rangle \langle \phi_{k'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \phi_{k'_N}| = \rho_{USU^\dagger,\Omega}, \end{aligned}$$

其中  $|\phi_{k_i}\rangle = |U_i\psi_{k_i}\rangle$ ,  $|\phi_{k'_i}\rangle = |U_i\psi_{k'_i}\rangle$  是  $U_i S_i U_i^\dagger$  对应于特征值  $\lambda_{k_i}$  与  $\lambda_{k'_i}$  的特征态, 因为

$$\begin{aligned} U_i S_i U_i^\dagger |\phi_{k_i}\rangle &= U_i S_i U_i^\dagger |U_i\psi_{k_i}\rangle = U_i S_i |\psi_{k_i}\rangle \\ &= U_i (\lambda_{k_i} |\psi_{k_i}\rangle) = \lambda_{k_i} |\phi_{k_i}\rangle, \\ U_i S_i U_i^\dagger |\phi_{k'_i}\rangle &= U_i S_i U_i^\dagger |U_i\psi_{k'_i}\rangle = U_i S_i |\psi_{k'_i}\rangle \\ &= U_i (\lambda_{k'_i} |\psi_{k'_i}\rangle) = \lambda_{k'_i} |\phi_{k'_i}\rangle. \end{aligned}$$

这反映了  $U\rho_{S,\Omega}U^\dagger$  是输入可观测量为  $USU^\dagger$ 、参数为  $\Omega$  的 NNQMVS, 并且它与  $\rho_{S,\Omega}$  有相同的波函数.

**注 2** 由命题 3 可以看出, 如果两个混合态是局部酉等价的, 并且能够给出其中一个态的 NNQMVS 表示, 那么另一个态的 NNQMVS 表示可以由前者得到.

### 3 神经网络量子混合态

采用神经网络框架 (图 1) 构建的神经网络量子拟态  $\rho_{S,\Omega}$  未必是半正定的, 下面借助纯化的思想

引入另一种神经网络框架.

为了构建量子系统  $Q$  上的神经网络混合态, 借助纯化的思想, 引入辅助系统  $R$ , 它为  $R_1, R_2, \dots, R_L$  的复合系统, 态空间为  $\mathcal{R} := \mathcal{R}_1 \otimes \mathcal{R}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{R}_L$ . 将  $Q$  上神经网络混合态  $\rho$  进行纯化, 得到联合系统  $QR$  上的纯态  $|\psi\rangle$ , 使得  $\rho = \text{tr}_R |\psi\rangle \langle \psi|$ . 然后, 利用纯态的神经网络表示  $|\psi_{\text{NNQS}}\rangle$  得到  $\rho$  的神经网络混合态表示:  $\rho = \text{tr}_R |\psi_{\text{NNQS}}\rangle \langle \psi_{\text{NNQS}}|$ . 这一思想源于文献 [25, 35, 37], 可称其为纯化表示法. 下面给出更为一般的纯化表示法, 具体做法如下. 假设  $F_1, F_2, \dots, F_L$  分别为系统  $R_1, R_2, \dots, R_L$  上的非退化可观测量, 自伴算子  $F_j$  的特征值与特征基分别为  $f_j, |\phi_j\rangle$ , 则  $F_j |\phi_j\rangle = f_j |\phi_j\rangle$ . 易知  $F = F_1 \otimes F_2 \otimes \dots \otimes F_L$  的特征值与特征基分别为

$$f_1 f_2 \dots f_L, |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_L\rangle.$$

设混合态  $\rho$  的纯化  $|\psi\rangle$  的神经网络量子表示 [27] 为  $|\psi_{S \otimes F, \Theta}\rangle$ , 即  $|\psi\rangle = z |\psi_{S \otimes F, \Theta}\rangle$ , 其中

$$|\psi_{S \otimes F, \Theta}\rangle = \sum_{\lambda_{k_j}, f_p} \psi_{S \otimes F, \Theta}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, f_1, \dots, f_L) |\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_N}\rangle \otimes |\phi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_L\rangle,$$

$\Theta = (a, b, c, W, U)$ , 且

$$\begin{aligned} & \psi_{S \otimes F, \Theta}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, f_1, \dots, f_L) \\ &= \sum_{h_i = \pm 1} \exp \left( \sum_{j=1}^N a_j \lambda_{k_j} + \sum_{i=1}^M b_i h_i + \sum_{p=1}^L c_p f_p + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N h_i W_{ij} \lambda_{k_j} + \sum_{p=1}^L \sum_{j=1}^N f_p U_{pj} \lambda_{k_j} \right). \end{aligned}$$

定义

$$\rho_{S, \Theta} = \text{tr}_R(|\psi_{S \otimes F, \Theta}\rangle \langle \psi_{S \otimes F, \Theta}|) = \sum_{\lambda_{k_j}, \lambda_{k'_j}} \rho_{S, \Theta}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_N}) |\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_N}\rangle \langle \psi_{k'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \psi_{k'_N}|,$$

其中

$$\rho_{S, \Theta}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_N}) = \sum_{f_p} \psi_{S \otimes F, \Theta}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, f_1, \dots, f_L) \times \psi_{S \otimes F, \Theta}(\lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_N}, f_1, \dots, f_L)^*. \quad (6)$$

易见,  $\rho_{S, \Theta}$  是半正定算子, 满足

$$\rho = c \rho_{S, \Theta}, \quad c = |z|^2 = \text{tr}(\rho_{S, \Theta}). \quad (7)$$

称  $\rho_{S, \Theta}$  为混合态  $\rho$  的、由参数  $\Theta = (a, b, c, W, U)$  和输入可观测量  $S$  诱导的神经网络量子混合态 (NNQMS). 相应的神经网络见图 3, 其是一个具有  $2N$  个可视人工神经元 (蓝色圆盘)、 $2M$  个隐藏神经元 (黄色圆盘) 和  $L$  个辅助神经元 (绿色圆盘) 构成的深度神经网络.

计算可知,

$$\begin{aligned} & \rho_{S, \Theta}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N}) \\ &= \sum_{f_p} \sum_{h_i = \pm 1} \sum_{h'_i = \pm 1} \exp \left( \sum_{j=1}^N a_j \lambda_{k_j} + \sum_{i=1}^M b_i h_i + \sum_{p=1}^L c_p f_p + \sum_{j=1}^N a_j^* \lambda_{k'_j} + \sum_{i=1}^M b_i^* h'_i + \sum_{p=1}^L c_p^* f_p \right. \\ & \quad \left. + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N h_i W_{ij} \lambda_{k_j} + \sum_{p=1}^L \sum_{j=1}^N f_p U_{pj} \lambda_{k_j} + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N h'_i W_{ij}^* \lambda_{k'_j} + \sum_{p=1}^L \sum_{j=1}^N f_p U_{pj}^* \lambda_{k'_j} \right) \\ &= e^{\sum_{j=1}^N (a_j \lambda_{k_j} + a_j^* \lambda_{k'_j})} \prod_{i=1}^M 2 \cosh \left( b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij} \lambda_{k_j} \right) \prod_{i=1}^M 2 \cosh \left( b_i^* + \sum_{j=1}^N W_{ij}^* \lambda_{k'_j} \right) \\ & \quad \times \sum_{f_p} \exp \left[ \sum_{p=1}^L f_p \left( c_p + c_p^* + \sum_{j=1}^N (U_{pj} \lambda_{k_j} + U_{pj}^* \lambda_{k'_j}) \right) \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

特别地, 当  $S = \sigma_1^z \otimes \sigma_2^z \otimes \dots \otimes \sigma_N^z$  时, 可得

$$\lambda_{k_j} = \begin{cases} 1, & k_j = 0; \\ -1, & k_j = 1, \end{cases} \quad |\psi_{k_j}\rangle = \begin{cases} |0\rangle, & k_j = 0; \\ |1\rangle, & k_j = 1. \end{cases} \quad (1 \leq j \leq N).$$

当  $F = \sigma_1^z \otimes \sigma_2^z \otimes \dots \otimes \sigma_L^z$  时, 有

$$f_j = \begin{cases} 1, & |\phi_j\rangle = |0\rangle; \\ -1, & |\phi_j\rangle = |1\rangle. \end{cases}$$

此时, NNQMS  $\rho_{S, \Theta}$  变为

$$\rho_{S, \Theta} = \sum_{\lambda_{k_j}, \lambda_{k'_j} = \pm 1} \rho_{S, \Theta}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_N}) |\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_N}\rangle \langle \psi_{k'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \psi_{k'_N}|, \quad (9)$$



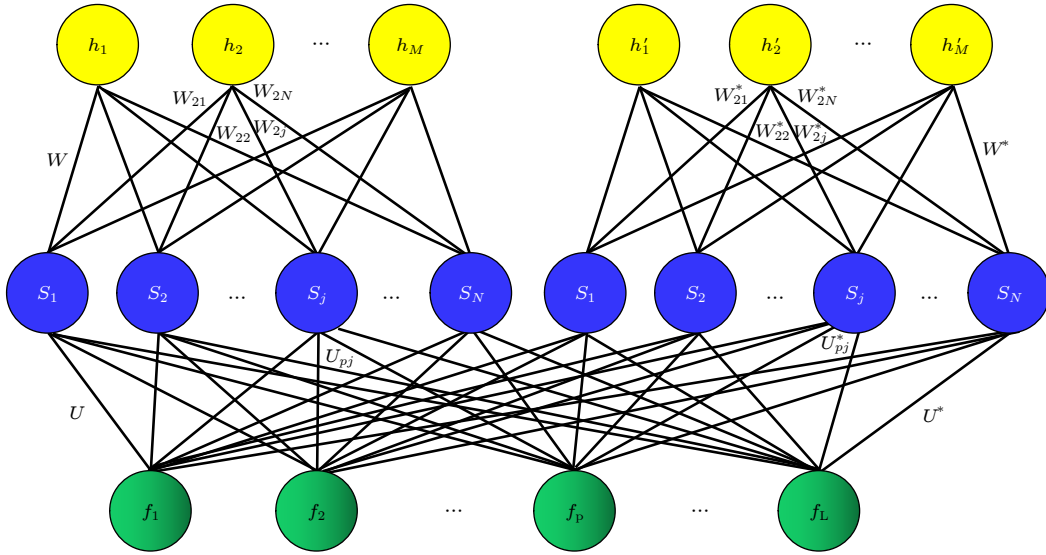


图 3 NNQMS 相匹配的深度神经网络

Fig. 3. Deep neural network encoding an NNQMS.

其中

$$\begin{aligned} & \rho_{S,\Theta}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N}) \\ &= e^{\sum_{j=1}^N (a_j \lambda_{k_j} + a_j^* \lambda_{k'_j})} \prod_{i=1}^M 2 \cosh \left( b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij} \lambda_{k_j} \right) \prod_{i=1}^M 2 \cosh \left( b_i^* + \sum_{j=1}^N W_{ij}^* \lambda_{k'_j} \right) \\ & \times \prod_{p=1}^L 2 \cosh \left( c_p + c_p^* + \sum_{j=1}^N (U_{pj} \lambda_{k_j} + U_{pj}^* \lambda_{k'_j}) \right). \end{aligned} \quad (10)$$

将这种 NNQMS 称为自旋  $z$  NNQMS.

这种特殊的 NNQMS 与文献 [36, 38] 中构建的量子态类似. 而本工作构建的 NNQMS 更具一般性, 因为其输入可观测量  $S$  可以随意选取, 未必是  $\sigma_1^z \otimes \sigma_2^z \otimes \dots \otimes \sigma_N^z$ . 虽然文献 [25, 35, 37] 中也使用纯化的思想构建了神经网络对应的量子态, 但是其利用神经网络分别表示被纯化后纯态波函数的振幅和相位, 因此构建的量子态中涉及两个神经网络, 而本文构建的量子态只涉及一个神经网络, 这也是两者本质的区别, 并且这些文献中神经网络中隐藏神经元  $h_i$  的取值为 0, 1, 而这里选取 1, -1.

特别地, 当  $L = 0$  时, 即没有辅助神经元,  $\rho_{S,\Theta} = |\psi\rangle\langle\psi|$ , 其中

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \prod_{j=1}^N e^{a_j \lambda_{k_j}} \cdot \prod_{i=1}^M 2 \cosh \left( b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij} \lambda_{k_j} \right) \\ &\times |\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_N}\rangle. \end{aligned}$$

可见,  $\rho_{S,\Theta}$  为神经网络量子纯态 [27]. 这也说明神经

网络量子混合态是神经网络量子纯态的推广.

**注 3** 为了寻求 NNQMVS 与 NNQMS 之间的联系, 也为了便于区分 (3) 式与 (10) 式的参数, 将 (3) 式改写为

$$\begin{aligned} & \rho_{S,\Omega}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_N}) \\ &= \prod_{j=1}^N e^{\tilde{a}_j^1 \lambda_{k_j} + \tilde{a}_j^2 \lambda_{k'_j}} \cdot \prod_{i=1}^{\tilde{M}} 2 \cosh \left( \tilde{b}_i \right. \\ & \quad \left. + \sum_{j=1}^N \tilde{W}_{ij}^1 \lambda_{k_j} + \sum_{j=1}^N \tilde{W}_{ij}^2 \lambda_{k'_j} \right). \end{aligned}$$

令  $\tilde{M} = 2M + L$ , 且

$$\tilde{b}_i = b_i, \quad \tilde{W}_{ij}^1 = W_{ij}, \quad \tilde{W}_{ij}^2 = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, M),$$

$$\begin{aligned} \tilde{b}_i &= b_i^*, \quad \tilde{W}_{ij}^1 = 0, \quad \tilde{W}_{ij}^2 = W_{ij}^* \\ (i &= M + 1, M + 2, \dots, 2M), \end{aligned}$$

$$\tilde{b}_i = c_i + c_i^*, \quad \tilde{W}_{ij}^1 = U_{ij},$$

$$\tilde{W}_{ij}^2 = U_{ij}^* \quad (i = 2M + 1, 2M + 2, \dots, 2M + L),$$

则  $\rho_{S,\Omega}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}) = \rho_{S,\Theta}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_{N'}})$ , 进而  $\rho_{S,\Omega} = \rho_{S,\Theta}$ , 于是 NNQMVS 变为 NNQMS, 这也说明 NNQMVS 更具一般性.

下面探讨神经网络量子混合态的性质. 由神经网络量子混合态的定义, 类似于注 1 与命题 1 的讨论, 可以得到下面的结论.

**命题 4** 神经网络量子混合态相匹配的人工神经网络不唯一.

探讨 NNQMS 的张量积, 可以得到下面的结论.

**命题 5** 如果  $\rho'_{S',\Theta'}$  和  $\rho''_{S'',\Theta''}$  都是 NNQMS, 参数分别为

$\begin{cases} S' = S'_1 \otimes \dots \otimes S'_{N'}, & \Theta' = (a', b', c', W', U'), \\ S'' = S''_1 \otimes \dots \otimes S''_{N''}, & \Theta'' = (a'', b'', c'', W'', U''). \end{cases}$   
那么  $\rho'_{S',\Theta'} \otimes \rho''_{S'',\Theta''}$  也是一个 NNQMS $_{\rho_{S,\Theta}}$ , 其参数为

$$\begin{aligned} S &= S' \otimes S'', \quad N = N' + N'', \\ M &= M' + M'', \quad L = L' + L'', \end{aligned}$$

$$\Theta = (a, b, c, W, U), \quad a = \begin{pmatrix} a' \\ a'' \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b' \\ b'' \end{pmatrix},$$

$$c = \begin{pmatrix} c' \\ c'' \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} W' & \\ & W'' \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} U' & \\ & U'' \end{pmatrix}.$$

**证明** 因为  $\rho'_{S',\Theta'}$  和  $\rho''_{S'',\Theta''}$  都为 NNQMS, 所以

$$\begin{aligned} \rho'_{S',\Theta'} &= \sum_{\lambda_{k_j}, \lambda_{k'_j}} \rho'_{S',\Theta'}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_{N'}}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}) |\psi_{k_1}\rangle \otimes |\psi_{k_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_{N'}}\rangle \langle \psi_{k'_1}| \otimes \langle \psi_{k'_2}| \otimes \dots \otimes \langle \psi_{k'_{N'}}|, \\ \rho''_{S'',\Theta''} &= \sum_{\mu_{m_j}, \mu_{m'_j}} \rho''_{S'',\Theta''}(\mu_{m_1}, \mu_{m_2}, \dots, \mu_{m_{N''}}, \mu_{m'_1}, \mu_{m'_2}, \dots, \mu_{m'_{N''}}) |\phi_{m_1}\rangle \otimes |\phi_{m_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{m_{N''}}\rangle \langle \phi_{m'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \phi_{m'_{N''}}|. \end{aligned}$$

令  $S = S' \otimes S'', N = N' + N'', M = M' + M'', L = L' + L'',$

$$\Theta = (a, b, c, W, U), \quad a = \begin{pmatrix} a' \\ a'' \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b' \\ b'' \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} c' \\ c'' \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} W' & \\ & W'' \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} U' & \\ & U'' \end{pmatrix}.$$

$$(\xi_{l_1}, \xi_{l_2}, \dots, \xi_{l_N}, \xi_{l'_1}, \xi_{l'_2}, \dots, \xi_{l'_{N'}}) = (\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_{N'}}, \mu_{m_1}, \dots, \mu_{m_{N''}}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}, \mu_{m'_1}, \dots, \mu_{m'_{N''}}),$$

利用 (8) 式计算可得

$$\begin{aligned} &\rho'_{S',\Theta'}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_{N'}}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}) \times \rho''_{S'',\Theta''}(\mu_{m_1}, \mu_{m_2}, \dots, \mu_{m_{N''}}, \mu_{m'_1}, \mu_{m'_2}, \dots, \mu_{m'_{N''}}) \\ &= e^{\sum_{j=1}^{N'} (a'_j \lambda_{k_j} + a'^*_{j'} \lambda_{k'_j})} \prod_{i=1}^{M'} 2 \cosh \left( b'_i + \sum_{j=1}^{N'} W'_{ij} \lambda_{k_j} \right) \times \prod_{i=1}^{M''} 2 \cosh \left( b''_i + \sum_{j=1}^{N''} W''_{ij} \lambda_{k'_j} \right) \\ &\quad \times \sum_{f'_p} \exp \left[ f'_p \left( c'_p + c'^*_{p'} + \sum_{j=1}^{N'} (U'_{pj} \lambda_{k_j} + U'^*_{p'j} \lambda_{k'_j}) \right) \right] \times e^{\sum_{j=1}^{N''} (a''_j \mu_{m_j} + a''^*_{j'} \mu_{m'_j})} \prod_{i=1}^{M''} 2 \cosh \left( b''_i + \sum_{j=1}^{N''} W''_{ij} \mu_{m_j} \right) \\ &\quad \times \prod_{i=1}^{M''} 2 \cosh \left( b''^*_i + \sum_{j=1}^{N''} W''^*_{ij} \mu_{m'_j} \right) \sum_{f''_p} \exp \left[ f''_p \left( c''_p + c''^*_{p'} + \sum_{j=1}^{N''} (U''_{pj} \mu_{m_j} + U''^*_{p'j} \mu_{m'_j}) \right) \right] \\ &= e^{\sum_{j=1}^N (a_j \xi_{l_j} + a^*_{j'} \xi_{l'_j})} \prod_{i=1}^M 2 \cosh \left( b_i + \sum_{j=1}^N W_{ij} \xi_{l_j} \right) \prod_{i=1}^M 2 \cosh \left( b^*_i + \sum_{j=1}^N W^*_{ij} \xi_{l'_j} \right) \\ &\quad \times \sum_{f_p} \exp \left[ f_p \left( c_p + c^*_{p'} + \sum_{j=1}^N (U_{pj} \xi_{l_j} + U^*_{p'j} \xi_{l'_j}) \right) \right] = \rho_{S,\Theta}(\xi_{l_1}, \xi_{l_2}, \dots, \xi_{l_N}, \xi_{l'_1}, \xi_{l'_2}, \dots, \xi_{l'_{N'}}), \end{aligned}$$

再令

$$|\xi_{l_i}\rangle = \begin{cases} |\psi_{k_i}\rangle, & i \in \{1, 2, \dots, N'\}, \\ |\phi_{m_{i-N'}}\rangle, & i \in \{N' + 1, N' + 2, \dots, N\}, \end{cases}$$

可得

$$\begin{aligned}
 & \rho'_{S',\Theta'} \otimes \rho''_{S'',\Theta''} \\
 &= \sum_{\lambda_{k_j}, \lambda_{k'_j}} \rho'_{S',\Theta'}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}) \times \sum_{\mu_{m_j}, \mu_{m'_j}} \rho''_{S'',\Theta''}(\mu_{m_1}, \dots, \mu_{m_N}, \mu_{m'_1}, \dots, \mu_{m'_{N''}}) \\
 & \quad \times |\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_{N'}}\rangle \otimes |\phi_{m_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{m_{N''}}\rangle \langle \psi_{k'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \psi_{k'_{N'}}| \otimes \langle \phi_{m'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \phi_{m'_{N''}}| \\
 &= \sum_{\xi_{l_j}, \xi_{l'_j}} \rho_{S,\Theta}(\xi_{l_1}, \dots, \xi_{l_N}, \xi_{l'_1}, \dots, \xi_{l'_{N'}}) \times |\varphi_{l_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{l_N}\rangle \langle \varphi_{l_1}| \otimes \dots \otimes \langle \varphi_{l_N}| = \rho_{S,\Theta}.
 \end{aligned}$$

于是, 两个 NNQMS 的张量积也是一个 NNQMS.

讨论局部酉操作对 NNQMS 的影响, 可得结论如下.

**命题 6** 若  $\rho_{S,\Theta}$  是一个 NNQMS,  $U = U_1 \otimes U_2 \otimes \dots \otimes U_N$  是  $\mathcal{H}$  上的局域酉算子, 则

$$U \rho_{S,\Theta} U^\dagger = \rho_{USU^\dagger, \Theta},$$

即  $U \rho_{S,\Theta} U^\dagger$  也是一个 NNQMS, 其输入可观测量为  $USU^\dagger$ 、参数为  $\Theta$ , 且与  $\rho_{S,\Theta}$  有相同的波函数.

**证明** 因为  $\rho_{S,\Theta}$  是一个 NNQMS 且  $U$  是  $\mathcal{H}$  上的局域酉算子, 计算可得

$$\begin{aligned}
 U \rho_{S,\Theta} U^\dagger &= \sum_{\Lambda_{k_1 k_2 \dots k_N, k'_1 k'_2 \dots k'_{N'}} \in V(S, S)} \rho_{S,\Theta}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}) |U_1 \psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |U_N \psi_{k_N}\rangle \langle U_1 \psi_{k'_1}| \otimes \dots \\
 & \quad \otimes \langle U_N \psi_{k'_N}| = \sum_{\Lambda_{k_1 k_2 \dots k_N, k'_1 k'_2 \dots k'_{N'}} \in V(USU^\dagger, USU^\dagger)} \rho_{USU^\dagger, \Theta}(\lambda_{k_1}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}) |\phi_{k_1}\rangle \otimes \\
 & \quad \dots \otimes |\phi_{k_N}\rangle \langle \phi_{k'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \phi_{k'_{N'}}| = \rho_{USU^\dagger, \Theta},
 \end{aligned}$$

其中  $|\phi_{k_i}\rangle = |U_i \psi_{k_i}\rangle$ ,  $|\phi_{k'_i}\rangle = |U_i \psi_{k'_i}\rangle$  是  $U_i S_i U_i^\dagger$  对应于特征值  $\lambda_{k_i}$  与  $\lambda_{k'_i}$  的特征态, 因为

$$U_i S_i U_i^\dagger |\phi_{k_i}\rangle = U_i S_i U_i^\dagger |U_i \psi_{k_i}\rangle = U_i S_i |\psi_{k_i}\rangle = U_i (\lambda_{k_i} |\psi_{k_i}\rangle) = \lambda_{k_i} |\phi_{k_i}\rangle,$$

$$U_i S_i U_i^\dagger |\phi_{k'_i}\rangle = U_i S_i U_i^\dagger |U_i \psi_{k'_i}\rangle = U_i S_i |\psi_{k'_i}\rangle = U_i (\lambda_{k'_i} |\psi_{k'_i}\rangle) = \lambda_{k'_i} |\phi_{k'_i}\rangle.$$

这反映了  $U \rho_{S,\Theta} U^\dagger$  是输入可观测量为  $USU^\dagger$ 、参数为  $\Theta$  的 NNQMS, 并且它与  $\rho_{S,\Theta}$  有相同的波函数.

**注 4** 由命题 6 可以看出, 如果两个混合态是局部酉等价的, 并且能够给出其中一个态的 NNQMS 表示, 那么另一个态的 NNQMS 表示可以由前者得到.

## 4 混合态的神经网络表示

借助两种神经网络架构分别构建的 NNQMVS 与 NNQMS, 讨论混合态的神经网络表示问题. 给定混合态:

$$\rho = \sum_{\Lambda_{k_1, k_2, \dots, k_N, k'_1, k'_2, \dots, k'_{N'}} \in V(S, S)} T(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_{N'}}) |\psi_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{k_N}\rangle \langle \psi_{k'_1}| \otimes \dots \otimes \langle \psi_{k'_{N'}}|,$$

其中  $T(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_{N'}})$  是定义在集合  $V(S, S)$  上的复值函数且

$$\sum_{\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}} T(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}) = 1.$$

令  $\rho_{S,\Omega,z} = z \cdot \rho_{S,\Omega}$ , 其中  $z$  是归一化常数, 使得  $\rho_{S,\Omega,z}$  的迹为 1. 令:

$$\Delta_{\text{NNQMVS}}(\rho) = \min \{ \|\rho - \rho_{S,\Omega,z}\|_2 : z \in \mathbb{C}, a \in \mathbb{C}^{2N}, b \in \mathbb{C}^M, W \in \mathbb{C}^{M \times 2N} \},$$

称其为  $\rho$  由规范化 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  逼近的最佳逼近度, 其中,

$$\|\rho - \rho_{S,\Omega,z}\|_2^2 = \sum_{\Lambda_{k_1 k_2 \dots k_N, k'_1 k'_2 \dots k'_N} \in V(S,S)} |z \rho_{S,\Omega}(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N}) - T(\lambda_{k_1}, \lambda_{k_2}, \dots, \lambda_{k_N}, \lambda_{k'_1}, \lambda_{k'_2}, \dots, \lambda_{k'_N})|^2.$$

显然, 混合态  $\rho$  能由规范化的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示当且仅当  $\Delta_{\text{NNQMVS}}(\rho) = 0$ .

特别地, 可以考虑混合态  $\rho$  由规范化的自旋  $z$  且对偶的 NNQMVS 逼近的最佳逼近度, 也可以考虑混合态  $\rho$  由规范化的自旋  $z$  且反对偶的 NNQMVS 逼近的最佳逼近度, 还可以考虑混合态  $\rho$  由规范化的自旋  $z$  的 (或一般的) NNQMVS 逼近的最佳逼近度.

令  $\rho_{S,\Theta,z} = z \cdot \rho_{S,\Theta}$ , 类似地, 可以定义混合态  $\rho$  由规范化 NNQMS  $\rho_{S,\Theta,z}$  逼近的最佳逼近度:

$$\Delta_{\text{NNQMS}}(\rho) = \min \{ \|\rho - \rho_{S,\Theta,z}\|_2 : z \in \mathbb{C}, a \in \mathbb{C}^N, b \in \mathbb{C}^M, c \in \mathbb{C}^L, W \in \mathbb{C}^{M \times N}, U \in \mathbb{C}^{L \times N} \}.$$

下面重点考虑可以用这两种神经网络架构表示的混合态的类型.

**定理 1** 任意单量子比特态  $\rho$  都可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**证明** 因为  $\rho$  是半正定的, 所以存在酉矩阵  $U$  使得:

$$U\rho U^\dagger = \begin{pmatrix} p_1 & 0 \\ 0 & p_2 \end{pmatrix},$$

其中  $p_1, p_2 \geq 0, p_1 + p_2 = 1$ . 可能出现下列 3 种情形:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_1 & 0 \\ 0 & p_2 \end{pmatrix} (p_1, p_2 > 0, p_1 + p_2 = 1).$$

1) 当  $U\rho U^\dagger = |0\rangle\langle 0|$  时, 混合态:

$$\tilde{\rho} := \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|0\rangle\langle 1| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|$$

可以由规范化的自旋  $z$  且对偶的 NNQMVS  $\tilde{\rho}_{\sigma_1^z,\Omega,z}$  表示, 即  $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}_{\sigma_1^z,\Omega,z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{1}{4}, a = \begin{pmatrix} k\pi i \\ -k\pi i \end{pmatrix}, b=0, W = (\pi i \quad -\pi i).$$

同时,  $\tilde{\rho}$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\tilde{\rho}_{\sigma_1^z,\Theta,z}$  表示, 即  $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}_{\sigma_1^z,\Theta,z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Theta$  为

$$z = \frac{1}{4}, a_1 = k\pi i, b_1 = 0, c_1 = 0, W_{11} = \frac{\pi i}{3}, U_{11} = \pi i.$$

因为

$$H\tilde{\rho}H^\dagger = |0\rangle\langle 0|, H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},$$

所以由命题 3 和命题 6 知:

$$|0\rangle\langle 0| = H(\tilde{\rho}_{\sigma_1^z,\Omega,z})H^\dagger = \tilde{\rho}_{H\sigma_1^z H^\dagger,\Omega,z} = \tilde{\rho}_{\sigma_1^x,\Omega,z},$$

$$|0\rangle\langle 0| = H(\tilde{\rho}_{\sigma_1^z,\Theta,z})H^\dagger = \tilde{\rho}_{H\sigma_1^z H^\dagger,\Theta,z} = \tilde{\rho}_{\sigma_1^x,\Theta,z},$$

因此,  $U\rho U^\dagger$  既可以由规范化的自旋  $z$  且对偶的 NNQMVS  $\tilde{\rho}_{\sigma_1^x,\Omega,z}$  表示, 如图 4(a) 所示; 也可以由规范化的 NNQMS  $\tilde{\rho}_{\sigma_1^x,\Theta,z}$  表示, 如图 4(b) 所示.

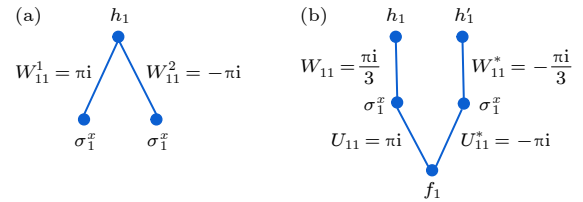


图 4  $|0\rangle\langle 0|$  的两种神经网络表示

Fig. 4. Two neural network representation of the state  $|0\rangle\langle 0|$ .

2) 当  $U\rho U^\dagger = |1\rangle\langle 1|$  时, 混合态

$$\hat{\rho} := \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| - \frac{1}{2}|0\rangle\langle 1| - \frac{1}{2}|1\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|$$

可以由规范化的自旋  $z$  且对偶的 NNQMVS  $\hat{\rho}_{\sigma_1^z,\Omega,z}$  表示, 即  $\hat{\rho} = \hat{\rho}_{\sigma_1^z,\Omega,z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{1}{4}, a = \begin{pmatrix} \frac{(2k+1)\pi i}{2} \\ -\frac{(2k+1)\pi i}{2} \end{pmatrix}, b=0, W = (\pi i \quad -\pi i).$$

同时,  $\hat{\rho}$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\hat{\rho}_{\sigma_1^z,\Theta,z}$  表示, 即  $\hat{\rho} = \hat{\rho}_{\sigma_1^z,\Theta,z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Theta$  为

$$z = \frac{1}{4}, a = \frac{(2k+1)\pi i}{2}, b_1 = 0, c_1 = 0,$$

$$W_{11} = \frac{\pi i}{3}, U_{11} = \pi i.$$

因为  $H\hat{\rho}H^\dagger = |1\rangle\langle 1|$ , 所以由命题 3 和命题 6 知:

$$|1\rangle\langle 1| = H(\hat{\rho}_{\sigma_1^z,\Omega,z})H^\dagger = \hat{\rho}_{H\sigma_1^z H^\dagger,\Omega,z} = \hat{\rho}_{\sigma_1^x,\Omega,z},$$

$$|1\rangle\langle 1| = H(\hat{\rho}_{\sigma_1^z,\Theta,z})H^\dagger = \hat{\rho}_{H\sigma_1^z H^\dagger,\Theta,z} = \hat{\rho}_{\sigma_1^x,\Theta,z}.$$

因此,  $U\rho U^\dagger$  既可以由规范化的自旋  $z$  且对偶的 NNQMVS  $\hat{\rho}_{\sigma_1^x,\Omega,z}$  表示, 如图 5(a) 所示; 也可以由规范化的 NNQMS  $\hat{\rho}_{\sigma_1^x,\Theta,z}$  表示, 如图 5(b) 所示.

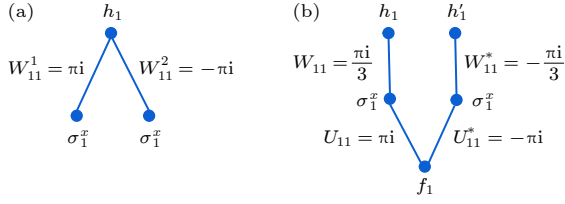

 图 5  $|1\rangle|1\rangle$  的两种神经网络表示

 Fig. 5. Two neural network representation of the state  $|1\rangle|1\rangle$ .

3) 当  $U\rho U^\dagger = p_1|0\rangle\langle 0| + p_2|1\rangle\langle 1|$  ( $p_1, p_2 > 0, p_1 + p_2 = 1$ ) 时,  $U\rho U^\dagger$  可以由规范化的自旋  $z$  且对偶的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Omega, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{1}{2}\sqrt{p_1 p_2}, \quad a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \end{pmatrix},$$

$$b = 0, \quad W = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & -\frac{\pi i}{4} \end{pmatrix},$$

如图 6(a) 所示.

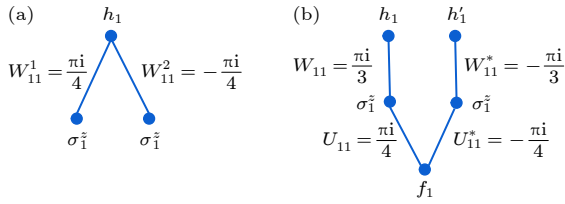

 图 6  $p_1|0\rangle\langle 0| + p_2|1\rangle\langle 1|$  ( $p_1, p_2 > 0, p_1 + p_2 = 1$ ) 的两种神经网络表示

 Fig. 6. Two neural network representation of the state  $p_1|0\rangle\langle 0| + p_2|1\rangle\langle 1|$  ( $p_1, p_2 > 0, p_1 + p_2 = 1$ ).

$U\rho U^\dagger$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Theta$  为

$$z = \frac{1}{2}\sqrt{p_1 p_2}, \quad a_1 = \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2}, \quad b_1 = 0,$$

$$c_1 = 0, \quad W_{11} = \frac{\pi i}{3}, \quad U_{11} = \frac{\pi i}{4}.$$

如图 6(b) 所示.

综上所述,  $U\rho U^\dagger$  既可以由 NNQMVS 表示, 又可以由 NNQMS 表示. 由命题 3 和命题 6 知, 任意单量子比特态  $\rho$  都可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**定理 2** 任意多个单量子比特态的乘积态  $\rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \dots \otimes \rho_m$  都可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**证明** 由命题 2、命题 5 与定理 1 可得.

**推论 1** 对于  $N$  量子比特态  $\rho$ , 若存在局域酉算子  $U$  使得:

$$U\rho U^\dagger = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{2^N} \end{pmatrix},$$

且  $p_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 2^N$ ) 中有一个为 1, 其余全为 0 时, 则  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**证明** 当  $p_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 2^N$ ) 中有一个为 1, 其余全为 0 时,  $U\rho U^\dagger$  可能出现  $2^N$  种情形:

$$|s_1 s_2 \dots s_N\rangle\langle s_1 s_2 \dots s_N|$$

$$= |s_1\rangle\langle s_1| \otimes |s_2\rangle\langle s_2| \otimes \dots \otimes |s_N\rangle\langle s_N|,$$

其中  $s_i = 0, 1$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ). 由定理 1 和定理 2 知: 这  $2^N$  种情形都可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示, 再由命题 3 和命题 6 知:  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**定理 3** 对于  $N$  量子比特态  $\rho$ , 若存在局域酉算子  $U$  使得:

$$U\rho U^\dagger = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{2^N} \end{pmatrix} \left( p_i > 0, \sum_{i=1}^{2^N} p_i = 1 \right),$$

每一个  $p_i$  都可表示为

$$p_i = p_{a_1 a_2 \dots a_k \dots a_N}, \quad (a_k = 0, 1; k = 1, 2, \dots, N),$$

其中  $a_1 a_2 \dots a_k \dots a_N$  为  $i-1$  的  $N$  位二进制表示, 且对于每一个  $j = 1, 2, \dots, N$ , 有  $2^{N-1}$  个

$$\frac{p_{a_1 a_2 \dots a_{j-1} 0 a_{j+1} \dots a_N}}{p_{a_1 a_2 \dots a_{j-1} 1 a_{j+1} \dots a_N}} \quad (a_k = 0, 1, k \neq j)$$

都相等, 则  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**证明** 当  $N = 1$  时, 由定理 1 知结论显然成立. 当  $N > 1$  时, 容易验证:

$$U\rho U^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{p_1}{p_1 + p_{1+2^{N-1}}} & 0 \\ 0 & \frac{p_{1+2^{N-1}}}{p_1 + p_{1+2^{N-1}}} \end{pmatrix}$$

$$\otimes \begin{pmatrix} \frac{p_1}{p_1 + p_{1+2^{N-2}}} & 0 \\ 0 & \frac{p_{1+2^{N-2}}}{p_1 + p_{1+2^{N-2}}} \end{pmatrix}$$

$$\otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} \frac{p_1}{p_1 + p_2} & 0 \\ 0 & \frac{p_2}{p_1 + p_2} \end{pmatrix}.$$

由定理 2 知,  $U\rho U^\dagger$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示. 再由命题 3 和命题 6 知,  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

特别地, 定理 3 中当  $N=2$  时可以得到下列推论.

**推论 2** 对于双量子比特态  $\rho$ , 若存在局域酉算子  $U$  使得:

$$U\rho U^\dagger = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_4 \end{pmatrix} \quad (p_i > 0, \sum_{i=1}^4 p_i = 1),$$

且  $p_1 p_4 = p_2 p_3$ , 则  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

特别地, 定理 3 中当  $N=3$  时可以得到下列推论.

**推论 3** 对于三量子比特态  $\rho$ , 若存在局域酉算子  $U$  使得:

$$U\rho U^\dagger = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_8 \end{pmatrix} \quad (p_i > 0, \sum_{i=1}^8 p_i = 1),$$

且  $\frac{p_1}{p_2} = \frac{p_5}{p_6} = \frac{p_7}{p_8}, \frac{p_1}{p_3} = \frac{p_2}{p_4} = \frac{p_5}{p_7}$ , 则  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

特别地, 定理 3 中当  $N=4$  时可以得到下列推论.

**推论 4** 对于三量子比特态  $\rho$ , 若存在局域酉算子  $U$  使得:

$$U\rho U^\dagger = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{16} \end{pmatrix} \quad \left(p_i > 0, \sum_{i=1}^{16} p_i = 1\right),$$

且  $\frac{p_1}{p_2} = \frac{p_3}{p_4} = \frac{p_9}{p_{10}} = \frac{p_{11}}{p_{12}}, \frac{p_1}{p_3} = \frac{p_9}{p_{11}}, \frac{p_1}{p_5} = \frac{p_2}{p_6} = \frac{p_3}{p_7} = \frac{p_4}{p_8} = \frac{p_9}{p_{13}} = \frac{p_{10}}{p_{14}} = \frac{p_{11}}{p_{15}}, \frac{p_1}{p_9} = \frac{p_8}{p_{16}}$ , 则  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**定理 4** 设  $p_1, p_2 > 0, p_1 + p_2 = 1, s_i = 0$  或  $1, \bar{0} = 1, \bar{1} = 0$ , 且

$$\rho = p_1 |s_1 s_2 \cdots s_N\rangle \langle s_1 s_2 \cdots s_N| + p_2 |\bar{s}_1 \bar{s}_2 \cdots \bar{s}_N\rangle \langle \bar{s}_1 \bar{s}_2 \cdots \bar{s}_N|,$$

则  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**证明** 1) 首先证明

$$\rho = p_1 |\underbrace{00 \cdots 0}_N \underbrace{00 \cdots 0}_N| + p_2 |\underbrace{11 \cdots 1}_N \underbrace{11 \cdots 1}_N|.$$

可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

I) 考虑  $\rho$  由规范化的自旋  $z$  且反对偶的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示.

$\rho$  可以由规范化的自旋  $z$  NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示, 其中网络参数  $b$  与  $W$  为

$$\text{i) 当 } N \text{ 为偶数时, } W_{ij}^2 = -(W_{ij}^1)^*,$$

$$b_1 = 0, W_{11}^1 = W_{12}^1 = W_{13}^1 = \cdots = W_{1N}^1 = \frac{\pi i}{4},$$

$$b_2 = \frac{\pi i}{2}, W_{21}^1 = W_{22}^1 = W_{23}^1 = \cdots = W_{2N}^1 = \frac{\pi i}{4N},$$

$$b_{2k+1} = \frac{N + x_{2k+1}}{N + 2k} \frac{\pi i}{2},$$

$$W_{(2k+1)1}^1 = W_{(2k+1)2}^1 = \cdots = W_{(2k+1)N}^1$$

$$= \frac{2k - x_{2k+1}}{N + 2k} \frac{\pi i}{8k}$$

$$(x_{2k+1} = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm(2k-1)),$$

$$b_{2k+2} = \frac{N + x_{2k+2}}{N + 2k} \frac{\pi i}{2},$$

$$W_{(2k+2)1}^1 = W_{(2k+2)2}^1 = \cdots = W_{(2k+2)N}^1$$

$$= -\frac{2k - x_{2k+2}}{N + 2k} \frac{\pi i}{8k}$$

$$(x_{2k+2} = 0, \pm 1, \cdots, \pm(2k-1)),$$

其中  $k = 1, 2, \cdots, (N-2)/2$ .

$$\text{ii) 当 } N \text{ 为奇数时, } W_{ij}^2 = -(W_{ij}^1)^*,$$

$$b_1 = \frac{\pi i}{2}, W_{11}^1 = W_{12}^1 = W_{13}^1 = \cdots = W_{1N}^1 = \frac{\pi i}{4},$$

$$b_{2k} = \frac{N + x_{2k}}{N + 2k - 1} \frac{\pi i}{2},$$

$$W_{(2k)1}^1 = W_{(2k)2}^1 = \cdots = W_{(2k)N}^1$$

$$= \frac{2k - 1 - x_{2k}}{N + 2k - 1} \frac{\pi i}{4(2k-1)}$$

$$(x_{2k} = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm(2k-2)),$$

$$b_{2k+1} = \frac{N + x_{2k+1}}{N + 2k - 1} \frac{\pi i}{2},$$

$$W_{(2k+1)1}^1 = \cdots = W_{(2k+1)N}^1$$

$$= -\frac{2k - 1 - x_{2k+1}}{N + 2k - 1} \frac{\pi i}{4(2k-1)}$$

$$(x_{2k+1} = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm(2k-2)),$$

其中  $k = 1, 2, \cdots, (N-1)/2$ .

令



$$x = \prod_{i=1}^N \cosh \left( b_i + \sum_{j=1}^N (W_{ij}^1 - \overline{W}_{ij}^1) \right),$$

$$y = \prod_{i=1}^N \cosh \left( b_i - \sum_{j=1}^N (W_{ij}^1 - \overline{W}_{ij}^1) \right).$$

$z$  与网络参数  $a$  根据以下情况确定.

a) 当  $x > 0, y > 0$  时:

$$z = \frac{1}{2^N} \sqrt{\frac{p_1 p_2}{xy}}, \quad a_1^1 = a_1^2 = \frac{1}{4} \ln \left( \frac{y p_1}{x p_2} \right),$$

$$a_2^1 = a_2^2 = a_3^1 = a_3^2 = \cdots = a_N^1 = a_N^2 = 0.$$

b) 当  $x > 0, y < 0$  时:

$$z = \frac{1}{2^N} \sqrt{-\frac{p_1 p_2}{xy}} i, \quad a_1^1 = a_1^2 = \frac{1}{4} \ln \left( -\frac{y p_1}{x p_2} \right),$$

$$a_2^1 = a_2^2 = -\frac{\pi i}{4}, \quad a_3^1 = a_3^2 = \cdots = a_N^1 = a_N^2 = 0.$$

c) 当  $x < 0, y > 0$  时:

$$z = \frac{1}{2^N} \sqrt{-\frac{p_1 p_2}{xy}} i, \quad a_1^1 = a_1^2 = \frac{1}{4} \ln \left( -\frac{y p_1}{x p_2} \right),$$

$$a_2^1 = a_2^2 = \pi i/4, \quad a_3^1 = a_3^2 = \cdots = a_N^1 = a_N^2 = 0.$$

d) 当  $x < 0, y < 0$  时:

$$z = \frac{1}{2^N} \sqrt{\frac{p_1 p_2}{xy}}, \quad a_1^1 = a_1^2 = \frac{1}{4} \ln \left( \frac{y p_1}{x p_2} \right),$$

$$a_2^1 = a_2^2 = \pi i/2, \quad a_3^1 = a_3^2 = \cdots = a_N^1 = a_N^2 = 0.$$

特别地, 当  $N = 2$  时, 神经网络如图 7(a) 所示, 当  $N = 3$  时, 神经网络如图 7(b) 所示, 当  $N = 4$  时, 神经网络如图 7(c) 所示.

II) 考虑  $\rho$  由规范化的一般的自旋  $z$  的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示.

$\rho$  可以由规范化的一般的自旋  $z$  NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示, 其中网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{\sqrt{p_1 p_2}}{2^{3N-2}}, \quad a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_0 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}_{3N-2},$$

$$W = \begin{pmatrix} A & A^* \\ B & O_{(N-1) \times N} \\ O_{(N-1) \times N} & B^* \end{pmatrix},$$

其中,

$$a_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}_N, \quad A = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & & & \\ & \frac{\pi i}{4} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{\pi i}{4} \end{pmatrix}_N,$$

$$B = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & -\frac{\pi i}{4} & & \\ & \frac{\pi i}{4} & -\frac{\pi i}{4} & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & \frac{\pi i}{4} & -\frac{\pi i}{4} \end{pmatrix}_{N-1},$$

神经网络表示如图 8 所示.

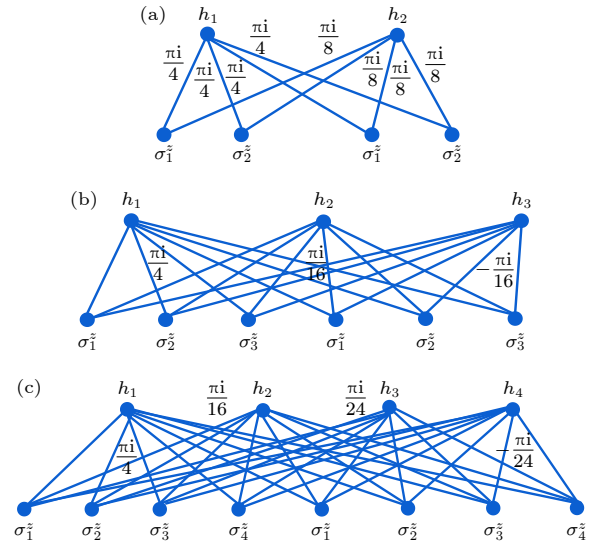


图 7  $\rho$  的反对偶的 NNQMVS 神经网络表示 (a)  $N = 2$ ; (b)  $N = 3$ ; (c)  $N = 4$

Fig. 7. Anti-dual NNQMVS neural network representation of the state  $\rho$ : (a)  $N = 2$ ; (b)  $N = 3$ ; (c)  $N = 4$ .

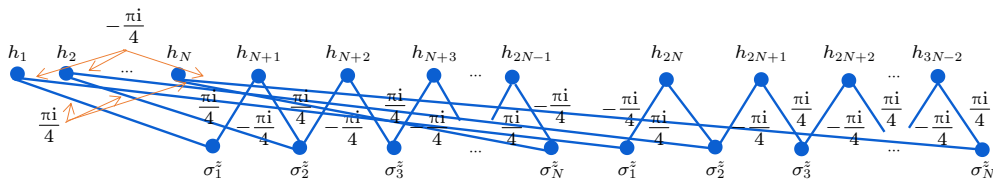


图 8  $\rho$  的 NNQMVS 神经网络表示

Fig. 8. NNQMVS neural network representation of the state  $\rho$ .

III) 考虑  $\rho$  由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{S,\Theta,z}$  表示.

$\rho$  可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{S,\Theta,z}$  表示, 其中网络参数  $\Theta$  为

$$z = \frac{\sqrt{p_1 p_2}}{2^{3N-2}}, \quad a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}_N,$$

$$b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}_{N-1}, \quad c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}_N,$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & -\frac{\pi i}{4} & & & \\ & \frac{\pi i}{4} & -\frac{\pi i}{4} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \frac{\pi i}{4} & -\frac{\pi i}{4} \\ & & & & \frac{\pi i}{4} & -\frac{\pi i}{4} \end{pmatrix}_{N-1},$$

$$U = \begin{pmatrix} \pi i/4 & & & \\ & \pi i/4 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \pi i/4 \end{pmatrix}_N,$$

神经网络表示如图 9 所示.

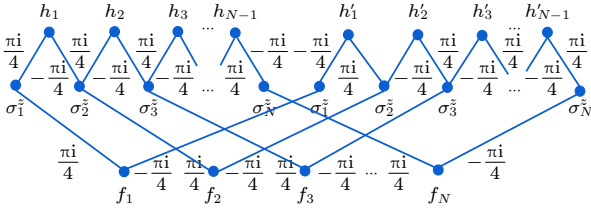


图 9  $\rho$  的 NNQMS 神经网络表示

Fig. 9. NNQMS neural network representation of the state  $\rho$ .

2) 然后证明

$$\rho = p_1 |s_1 s_2 \cdots s_N\rangle \langle s_1 s_2 \cdots s_N| + p_2 |\overline{s_1} \overline{s_2} \cdots \overline{s_N}\rangle \langle \overline{s_1} \overline{s_2} \cdots \overline{s_N}|$$

可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示. 令

$$U_i = \begin{cases} I, & s_i = 0; \\ \sigma_i^x, & s_i = 1, \end{cases}$$

显然  $U_i (i = 1, 2, \cdots, N)$  是酉算子. 易知:

$$U_1 \otimes U_2 \otimes \cdots \otimes U_N | \underbrace{00 \cdots 0}_N \rangle = |s_1 s_2 \cdots s_N\rangle,$$

$$U_1 \otimes U_2 \otimes \cdots \otimes U_N | \underbrace{11 \cdots 1}_N \rangle = |\overline{s_1} \overline{s_2} \cdots \overline{s_N}\rangle,$$

于是

$$\begin{aligned} & U_1 \otimes \cdots \otimes U_N (p_1 | \underbrace{00 \cdots 0}_N \rangle \langle \underbrace{00 \cdots 0}_N | + p_2 | \underbrace{11 \cdots 1}_N \rangle \langle \underbrace{11 \cdots 1}_N |) U_1^\dagger \otimes \cdots \otimes U_N^\dagger \\ &= p_1 |s_1 s_2 \cdots s_N\rangle \langle s_1 s_2 \cdots s_N| + p_2 |\overline{s_1} \cdots \overline{s_N}\rangle \langle \overline{s_1} \cdots \overline{s_N}|. \end{aligned}$$

由 1) 与命题 3、命题 6 可得:  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**定理 5** 对于  $N$  量子比特态  $\rho$ , 若存在局域酉算子  $U$  使得:

$$U \rho U^\dagger = p_1 |s_1 s_2 \cdots s_N\rangle \langle s_1 s_2 \cdots s_N| + p_2 |r_1 r_2 \cdots r_N\rangle \langle r_1 r_2 \cdots r_N|,$$

且  $s_i, r_i = 0, 1, p_1, p_2 > 0, p_1 + p_2 = 1$ , 则  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**证明** 这里只证  $N=2$  与  $N=3$ , 其余情形类似证明.

1) 当  $N=2$  时,

$$U \rho U^\dagger = \begin{cases} |s_1\rangle \langle s_1| \otimes (p_1 |s_2\rangle \langle s_2| + p_2 |r_2\rangle \langle r_2|), & s_1 = r_1, s_2 \neq r_2; \\ (p_1 |s_1\rangle \langle s_1| + p_2 |r_1\rangle \langle r_1|) \otimes |s_2\rangle \langle s_2|, & s_1 \neq r_1, s_2 = r_2; \\ p_1 |s_1 s_2\rangle \langle s_1 s_2| + p_2 |\overline{s_1} \overline{s_2}\rangle \langle \overline{s_1} \overline{s_2}|, & s_1 \neq r_1, s_2 \neq r_2. \end{cases}$$

由定理 2、定理 4、命题 3 与命题 6 知,  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

2) 当  $N=3$  时, 可分为下列四大类:

- i)  $s_1 = r_1, U \rho U^\dagger = |s_1\rangle \langle s_1| \otimes (p_1 |s_2 s_3\rangle \langle s_2 s_3| + p_2 |r_2 r_3\rangle \langle r_2 r_3|);$
- ii)  $s_1 \neq r_1, s_3 = r_3, U \rho U^\dagger = (p_1 |s_1 s_2\rangle \langle s_1 s_2| + p_2 |r_1 r_2\rangle \langle r_1 r_2|) \otimes |s_3\rangle \langle s_3|;$
- iii)  $s_1 \neq r_1, s_3 \neq r_3, s_2 \neq r_2, U \rho U^\dagger = p_1 |s_1 s_2 s_3\rangle \langle s_1 s_2 s_3| + p_2 |\overline{s_1} \overline{s_2} \overline{s_3}\rangle \langle \overline{s_1} \overline{s_2} \overline{s_3}|;$
- iv)  $s_1 \neq r_1, s_3 \neq r_3, s_2 = r_2, U \rho U^\dagger = p_1 |s_1 s_2 s_3\rangle \langle s_1 s_2 s_3| + p_2 |r_1 r_2 r_3\rangle \langle r_1 r_2 r_3|.$

显然, i) 和 ii) 可由已证的 1) 与定理 1、命题 2、命题 5、命题 3、命题 6 证明, iii) 可由命题 3、命题 6、定理 4 证明, 因此只需证明 iv), 而 iv) 类型共有 4 种情形, 下面分别证明.

$$\text{a) } U\rho U^\dagger = p_1|000\rangle\langle 000| + p_2|101\rangle\langle 101|$$

此时,  $U\rho U^\dagger$  可以由规范化的自旋  $z$  的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Omega, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{\sqrt{p_1 p_2}}{128}, a = \left( \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \quad 0 \quad 0 \quad \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \quad 0 \quad 0 \right)^T,$$

$$b = \left( 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \frac{\pi i}{4} \quad 0 \quad -\frac{\pi i}{4} \right)^T,$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & 0 & 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 & 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 & 0 & -\frac{\pi i}{4} \\ \frac{\pi i}{4} & 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 & \frac{\pi i}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 \end{pmatrix},$$

如图 10(a) 所示.

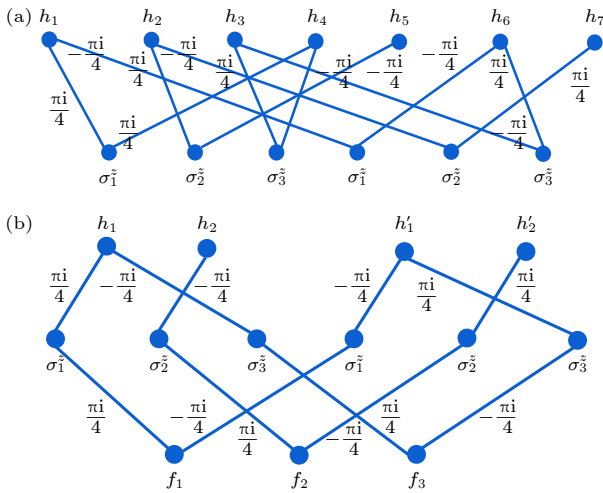


图 10  $U\rho U^\dagger$  的两种神经网络表示

Fig. 10. Two neural network representation of the state  $U\rho U^\dagger$ .

同时,  $U\rho U^\dagger$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$ , 其中  $z$  与网络参

数  $\Theta$  为

$$z = \frac{\sqrt{p_1 p_2}}{128}, a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\pi i}{4} \\ 0 \end{pmatrix}, c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & 0 & -\frac{\pi i}{4} \\ 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & & \\ & \frac{\pi i}{4} & \\ & & \frac{\pi i}{4} \end{pmatrix},$$

如图 10(b) 所示.

$$\text{b) } U\rho U^\dagger = p_1|001\rangle\langle 001| + p_2|100\rangle\langle 100|$$

此时,  $U\rho U^\dagger$  可以由规范化的自旋  $z$  的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Omega, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{\sqrt{p_1 p_2}}{128}, a = \left( \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \quad 0 \quad 0 \quad \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \quad 0 \quad 0 \right)^T,$$

$$b = \left( 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \frac{\pi i}{4} \quad 0 \quad -\frac{\pi i}{4} \right)^T,$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & 0 & 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 & 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 & 0 & -\frac{\pi i}{4} \\ \frac{\pi i}{4} & 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 & -\frac{\pi i}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 \end{pmatrix},$$

如图 11(a) 所示.

同时,  $U\rho U^\dagger$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Theta$  为

$$z = \frac{\sqrt{p_1 p_2}}{128}, a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\pi i}{4} \\ 0 \end{pmatrix}, c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

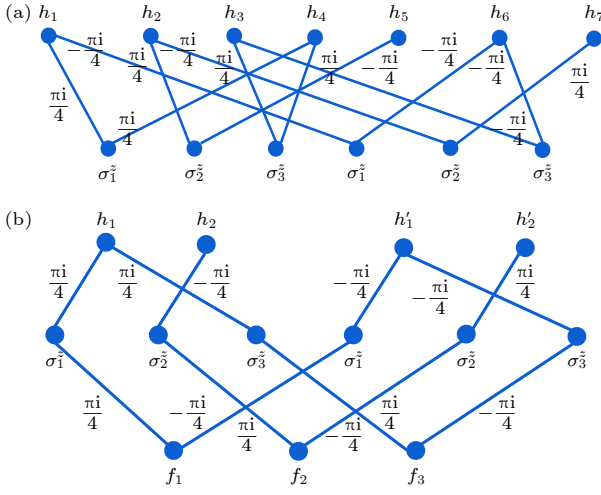

 图 11  $U\rho U^\dagger$  的两种神经网络表示

 Fig. 11. Two neural network representation of the state  $U\rho U^\dagger$ .

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi}{4} & 0 & \frac{\pi}{4} \\ 0 & -\frac{\pi}{4} & 0 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} \pi/4 & & \\ & \pi/4 & \\ & & \pi/4 \end{pmatrix},$$

如图 11(b) 所示.

$$c) U\rho U^\dagger = p_1|010\rangle\langle 010| + p_2|111\rangle\langle 111|$$

此时,  $U\rho U^\dagger$  可以由规范化的自旋  $z$  的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Omega, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{\sqrt{p_1 p_2}}{128}, a = \left( \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \quad 0 \quad 0 \quad \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \quad 0 \quad 0 \right)^T,$$

$$b = (0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \pi/4 \quad 0 \quad -\pi/4)^T,$$

$$W = \begin{pmatrix} \pi/4 & 0 & 0 & -\pi/4 & 0 & 0 \\ 0 & \pi/4 & 0 & 0 & -\pi/4 & 0 \\ 0 & 0 & \pi/4 & 0 & 0 & -\pi/4 \\ \pi/4 & 0 & -\pi/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi/4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\pi/4 & 0 & \pi/4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\pi/4 & 0 \end{pmatrix},$$

如图 12(a) 所示.

同时,  $U\rho U^\dagger$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Theta$  为

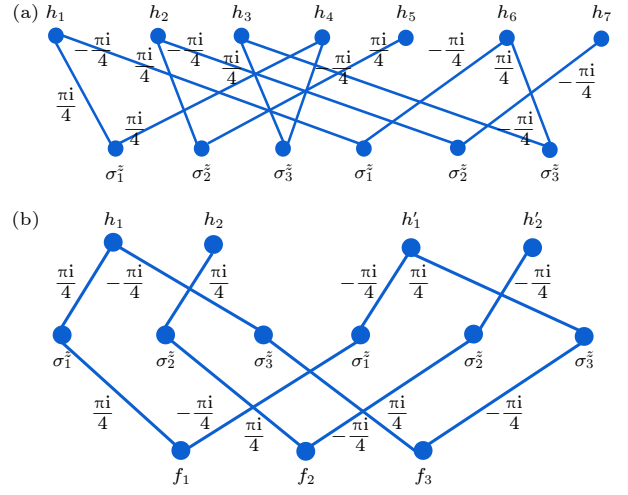

 图 12  $U\rho U^\dagger$  的两种神经网络表示

 Fig. 12. Two neural network representation of the state  $U\rho U^\dagger$ .

$$z = \frac{\sqrt{p_1 p_2}}{128}, a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 0 \\ \pi/4 \\ 0 \end{pmatrix}, c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi}{4} & 0 & -\frac{\pi}{4} \\ 0 & \frac{\pi}{4} & 0 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} \pi/4 & & \\ & \pi/4 & \\ & & \pi/4 \end{pmatrix},$$

如图 12(b) 所示.

$$d) U\rho U^\dagger = p_1|011\rangle\langle 011| + p_2|110\rangle\langle 110|$$

此时,  $U\rho U^\dagger$  可以由规范化的自旋  $z$  的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Omega, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{\sqrt{p_1 p_2}}{128}, a = \left( \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \quad 0 \quad 0 \quad \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \quad 0 \quad 0 \right)^T,$$

$$b = \left( 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \frac{\pi}{4} \quad 0 \quad -\frac{\pi}{4} \right)^T,$$

$$W = \begin{pmatrix} \pi/4 & 0 & 0 & -\pi/4 & 0 & 0 \\ 0 & \pi/4 & 0 & 0 & -\pi/4 & 0 \\ 0 & 0 & \pi/4 & 0 & 0 & -\pi/4 \\ \pi/4 & 0 & \pi/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi/4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\pi/4 & 0 & -\pi/4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\pi/4 & 0 \end{pmatrix},$$

如图 13(a) 所示.

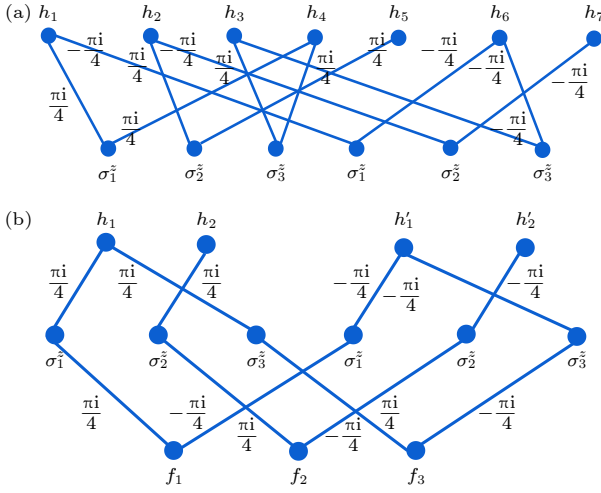

 图 13  $U\rho U^\dagger$  的两种神经网络表示

 Fig. 13. Two neural network representation of the state  $U\rho U^\dagger$ .

同时,  $U\rho U^\dagger$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Theta$  为

$$z = \frac{\sqrt{p_1 p_2}}{128}, a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{p_2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\pi i}{4} \\ 0 \end{pmatrix}, c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & 0 & \frac{\pi i}{4} \\ 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & & \\ & \frac{\pi i}{4} & \\ & & \frac{\pi i}{4} \end{pmatrix},$$

如图 13(b) 所示.

综上所述,  $U\rho U^\dagger$  既可以由 NNQMVS 表示, 又可以由 NNQMS 表示. 由命题 3 和命题 6 知,  $\rho$  都可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**定理 6** 对于双量子比特态  $\rho$ , 若存在局域酉算子  $U$  使得

$$U\rho U^\dagger = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_4 \end{pmatrix},$$

且  $\sum_{i=1}^4 p_i = 1$ , 当  $p_i (i = 1, 2, 3, 4)$  中有 3 个大于 0, 1 个为 0 时, 则  $\rho$  可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

**证明** 当  $p_i (i = 1, 2, 3, 4)$  中有 3 个大于 0, 1 个为 0 时, 可能出现 4 种情形, 下面分别进行证明.

1)  $U\rho U^\dagger = p_1|00\rangle\langle 00| + p_2|01\rangle\langle 01| + p_3|10\rangle\langle 10|$   
此时,  $U\rho U^\dagger$  可以由规范化的自旋  $z$  且反对偶的 NNQMVS  $\rho_{S, \Omega, z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Omega, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{1}{2} \sqrt{p_2 p_3}, a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{2p_3} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{2p_2} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{2p_3} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{2p_2} \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{2} \\ \frac{\pi i}{4} \\ \frac{\pi i}{4} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 \\ -\frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} \\ -\frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} \\ 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 & -\frac{\pi i}{4} \\ \frac{\pi i}{4} & \frac{\pi i}{4} & \frac{\pi i}{4} & \frac{\pi i}{4} \end{pmatrix},$$

如图 14(a) 所示.

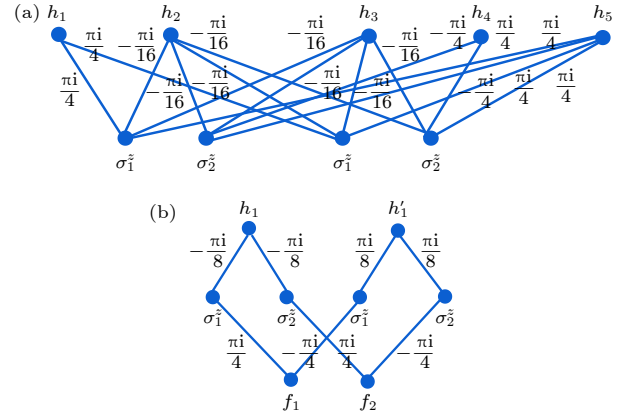

 图 14  $U\rho U^\dagger$  的两种神经网络表示

 Fig. 14. Two neural network representation of the state  $U\rho U^\dagger$ .

同时,  $U\rho U^\dagger$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Theta$  为

$$z = \frac{1}{8} \sqrt{p_2 p_3}, a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{2p_3} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{p_1}{2p_2} \end{pmatrix}, b = 0, c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} -\frac{\pi i}{8} & -\frac{\pi i}{8} \\ \frac{\pi i}{4} & \frac{\pi i}{4} \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & \\ & \frac{\pi i}{4} \end{pmatrix},$$

如图 14(b) 所示.

$$2) U\rho U^\dagger = p_1|00\rangle\langle 00| + p_2|01\rangle\langle 01| + p_4|11\rangle\langle 11|$$

此时,  $U\rho U^\dagger$  可以由规范化的自旋  $z$  且反对偶的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Omega, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{1}{2}\sqrt{p_1 p_4}, a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_2}{2p_4} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{2p_1}{p_2} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{p_2}{2p_4} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{2p_1}{p_2} \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{2} \\ \frac{\pi i}{4} \\ \frac{\pi i}{4} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 \\ -\frac{\pi i}{16} & \frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} & \frac{\pi i}{16} \\ -\frac{\pi i}{16} & \frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} & \frac{\pi i}{16} \\ 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 & -\frac{\pi i}{4} \\ \frac{\pi i}{4} & \frac{\pi i}{4} & \frac{\pi i}{4} & \frac{\pi i}{4} \end{pmatrix},$$

如图 15(a) 所示.

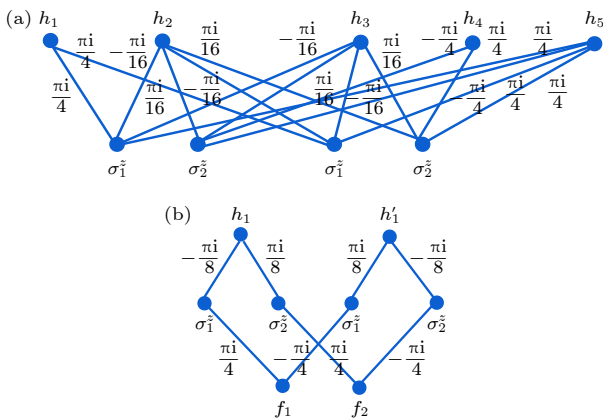


图 15  $U\rho U^\dagger$  的两种神经网络表示

Fig. 15. Two neural network representation of the state  $U\rho U^\dagger$ .

同时,  $U\rho U^\dagger$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$ , 其中  $z$  与网络参

数  $\Theta$  为

$$z = \frac{1}{8}\sqrt{p_1 p_4}, a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{p_2}{2p_4} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{2p_1}{p_2} \end{pmatrix}, b = \frac{\pi i}{4}, c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} -\frac{\pi i}{8} & \frac{\pi i}{8} \\ \frac{\pi i}{8} & \frac{\pi i}{8} \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & \\ & \frac{\pi i}{4} \end{pmatrix},$$

如图 15(b) 所示.

$$3) U\rho U^\dagger = p_1|00\rangle\langle 00| + p_3|10\rangle\langle 10| + p_4|11\rangle\langle 11|$$

此时,  $U\rho U^\dagger$  可以由规范化的自旋  $z$  且反对偶的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Omega, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{1}{2}\sqrt{p_1 p_4}, a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{2p_1}{p_3} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{p_3}{2p_4} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{2p_1}{p_3} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{p_3}{2p_4} \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{2} \\ \frac{\pi i}{4} \\ \frac{\pi i}{4} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & 0 & \frac{\pi i}{4} & 0 \\ \frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} & \frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} \\ \frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} & \frac{\pi i}{16} & -\frac{\pi i}{16} \\ 0 & -\frac{\pi i}{4} & 0 & -\frac{\pi i}{4} \\ \frac{\pi i}{4} & \frac{\pi i}{4} & \frac{\pi i}{4} & \frac{\pi i}{4} \end{pmatrix},$$

如图 16(a) 所示.

同时,  $U\rho U^\dagger$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Theta$  为

$$z = \frac{1}{8}\sqrt{p_1 p_4}, a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{2p_1}{p_3} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{p_3}{2p_4} \end{pmatrix}, b = \frac{\pi i}{4}, c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{8} & -\frac{\pi i}{8} \\ -\frac{\pi i}{8} & \frac{\pi i}{8} \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} \frac{\pi i}{4} & \\ & \frac{\pi i}{4} \end{pmatrix},$$

如图 16(b) 所示.



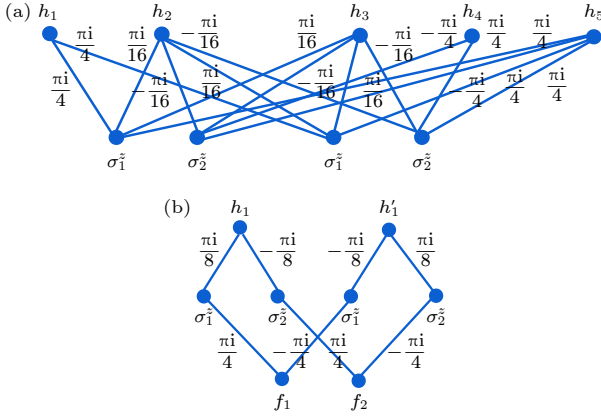

 图 16  $U\rho U^\dagger$  的两种神经网络表示

 Fig. 16. Two neural network representation of the state  $U\rho U^\dagger$ .

$$4) U\rho U^\dagger = p_2|01\rangle\langle 01| + p_3|10\rangle\langle 10| + p_4|11\rangle\langle 11|$$

此时,  $U\rho U^\dagger$  可以由规范化的自旋  $z$  且反对偶的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega,z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Omega, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Omega$  为

$$z = \frac{1}{2}\sqrt{p_2 p_3}, \quad a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{2p_2}{p_4} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{2p_3}{p_4} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{2p_2}{p_4} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{2p_3}{p_4} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} \frac{\pi}{2} \\ \frac{\pi}{4} \\ \frac{\pi}{4} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi}{4} & 0 & \frac{\pi}{4} & 0 \\ \frac{\pi}{16} & \frac{\pi}{16} & \frac{\pi}{16} & \frac{\pi}{16} \\ \frac{\pi}{16} & \frac{\pi}{16} & \frac{\pi}{16} & \frac{\pi}{16} \\ 0 & -\frac{\pi}{4} & 0 & -\frac{\pi}{4} \\ \frac{\pi}{4} & \frac{\pi}{4} & \frac{\pi}{4} & \frac{\pi}{4} \end{pmatrix},$$

如图 17(a) 所示.

同时,  $U\rho U^\dagger$  也可以由规范化的自旋  $z$  NNQMS  $\rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$  表示, 即  $U\rho U^\dagger = \rho_{\sigma_1^z, \Theta, z}$ , 其中  $z$  与网络参数  $\Theta$  为

$$z = \frac{1}{8}\sqrt{p_2 p_3}, \quad a = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \ln \frac{2p_2}{p_4} \\ \frac{1}{4} \ln \frac{2p_3}{p_4} \end{pmatrix}, \quad b = \frac{\pi}{4}, \quad c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{\pi}{8} & \frac{\pi}{8} \\ \frac{\pi}{8} & \frac{\pi}{8} \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} \pi/4 & \\ & \pi/4 \end{pmatrix},$$

如图 17(b) 所示.

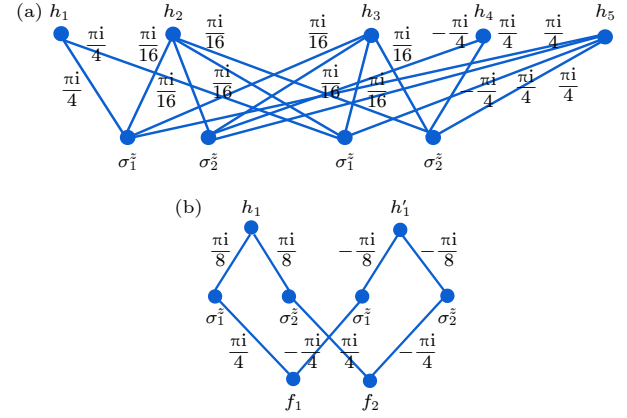

 图 17  $U\rho U^\dagger$  的两种神经网络表示

 Fig. 17. Two neural network representation of the state  $U\rho U^\dagger$ .

综上所述,  $U\rho U^\dagger$  既可以由 NNQMVS 表示, 又可以由 NNQMS 表示, 由命题 3 和命题 6 知,  $\rho$  都可以分别由 NNQMVS 和 NNQMS 表示.

## 5 结 论

本文研究了混合态的神经网络表示问题. 借助两种神经网络架构分别构建了具有一般输入可观测量的 NNQMVS 与 NNQMS, 得到了张量积运算、局部酉运算下 NNQMVS 与 NNQMS 的相关结论. 对于给定的混合态, 分别引入了其由规范化的 NNQMVS 与 NNQMS 逼近的最佳逼近度, 量化了给定混合态由规范化的 NNQMVS 与 NNQMS 逼近的程度, 给出了一般混合态能被规范化的 NNQMVS 与 NNQMS 表示的充要条件, 并探究了可以用这两种神经网络架构表示的混合态的类型, 得到了相关结论.

虽然借助神经网络架构 (图 1) 构建的 NNQMVS  $\rho_{S,\Omega}$  未必是半正定的, 但是半正定是它的一个子类, 当参数选取特殊时, 可以成为半正定, 在第 4 节也通过实例给出了某些混合态的 NNQMVS 表示, 这里的表示是精确的, 也间接反映了得到的 NNQMVS 是半正定的. 为了改进 NNQMVS, 借助纯化的思想引入另一种神经网络框架 (图 3), 增加了辅助神经元, 保证了构建的 NNQMS  $\rho_{S,\Theta}$

是半正定的. 另外, NNQMVS 中网络参数取特殊值可以变成 NNQMS, 这也间接的说明了 NNQMVS 更具一般性, 涵盖了 NNQMS, 在寻找混合态的神经网络表示时, 由于表示不唯一, 虽然搜索范围变大, 但是限制变少, 有可能更容易找到.

目前本文只给出了能用这两种神经网络架构精确表示的混合态的部分类型, 至于是否任何混合态都能用这两种神经网络架构精确表示还没有得到确切的答案, 这是一个非常有趣的研究课题, 有待于后续进一步探索.

## 参考文献

- [1] LeCun Y, Bengio Y, Hinton G 2015 *Nature* **521** 436
- [2] Biamonte J, Wittek P, Pancotti N, Rebentrost P, Wiebe N, Lloyd S 2017 *Nature* **549** 195
- [3] Ciliberto C, Herbster M, Ialongo A D, Pontil M, Rocchetto A, Severini S, Wossnig L 2018 *Proc. R. Soc. A* **474** 20170551
- [4] Schollwöck U 2011 *Ann. Phys.* **326** 96
- [5] Verstraete F, Murg V, Cirac J I 2008 *Adv. Phys.* **57** 143
- [6] Schuch N, Wolf M M, Verstraete F, Cirac J I 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 040501
- [7] Ceperley D, Alder B 1986 *Science* **231** 555
- [8] Loh E Y, Gubernatis J E, Scalettar R T, White S R, Scalapino D J, Sugar R L 1990 *Phys. Rev. B* **41** 9301
- [9] Schuch N, Wolf M M, Verstraete F, Cirac J I 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 140506
- [10] Verstraete F, Wolf M M, Perez-Garcia D, Cirac J I 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 220601
- [11] Carleo G, Troyer M 2017 *Science* **355** 602
- [12] Cheng S, Chen J, Wang L 2017 *Physics* **46** 416 (in Chinese) [程嵩, 陈靖, 王磊 2017 物理 **46** 416]
- [13] Cai Z 2017 *Physics* **46** 590 (in Chinese) [蔡子 2017 物理 **46** 590]
- [14] Ma Y C, Yung M H 2018 *Npj Quantum Inform.* **4** 34
- [15] Gao J, Qiao L F, Jiao Z Q, Ma Y C, Hu C Q, Ren R J, Yang A L, Tang H, Yung M H, Jin X M 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 240501
- [16] Qiu P H, Chen X G, Shi Y W 2019 *IEEE Access* **7** 94310
- [17] Deng D L, Li X P, Sarma S D 2017 *Phys. Rev. B* **96** 195145
- [18] Deng D L, Li X P, Sarma S D 2017 *Phys. Rev. X* **7** 021021
- [19] Deng D L 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 240402
- [20] Gao X, Duan L M 2017 *Nat. Commun.* **8** 662
- [21] Lu S, Gao X, Duan L M 2019 *Phys. Rev. B* **99** 155136
- [22] Gao X, Zhang Z Y, Duan L M 2018 *Sci. Adv.* **4** eaat9004
- [23] Carleo G, Nomura Y, Imada M 2018 *Nat. Commun.* **9** 5322
- [24] Glasser I, Pancotti N, August M, Rodriguez I D, Cirac J I 2018 *Phys. Rev. X* **8** 011006
- [25] Jia Z A, Yi B, Zhai R, Wu Y C, Guo G C, Guo G P 2019 *Adv. Quantum. Technol.* **2** 1800077
- [26] Hu L, Wu S H, Cai W Z, Ma Y W, Mu X J, Xu Y, Wang H Y, Song Y P, Deng D L, Zou C L, Sun L Y 2019 *Sci. Adv.* **5** 2761
- [27] Yang Y, Cao H X, Zhang Z J 2020 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **63** 210312
- [28] Sarma S D, Deng D L, Duan L M 2019 *Phys. Today* **72** 48
- [29] Carleo G, Cirac I, Cranmer K, Daudet L, Schuld M, Tishby N, Maranto L V, Zdeborová L 2019 *Rev. Mod. Phys.* **91** 045002
- [30] Lu S R, Duan L M, Deng D L 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033212
- [31] Yang G, Liu Q, Nie M, Liu Y H, Zhang M L 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 100301 (in Chinese) [杨光, 刘琦, 聂敏, 刘原华, 张美玲 2022 物理学报 **71** 100301]
- [32] Chen Y P, Liu J Y, Zhu J L, Fang W, Wang Q 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 220301 (in Chinese) [陈以鹏, 刘靖阳, 朱佳莉, 方伟, 王琴 2022 物理学报 **71** 220301]
- [33] Li W K, Lu S, Deng D L 2021 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **64** 100312
- [34] Li W K, Deng D L 2022 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **65** 220301
- [35] Torlai G, Melko R G 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 240503
- [36] Hartmann M J, Carleo G 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 250502
- [37] Vicentini F, Biella A, Regnault N, Ciuti C 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 250503
- [38] Nagy A, Savona V 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 250501
- [39] Yoshioka N, Hamazaki R 2019 *Phys. Rev. B* **99** 214306

# Two types of neural network representations of quantum mixed states<sup>\*</sup>

Yang Ying<sup>1)</sup> Cao Huai-Xin<sup>2)†</sup>

1) (*School of Mathematics and Information Technology, Yuncheng University, Yuncheng 044000, China*)

2) (*School of Mathematics and Statistics, Shaanxi Normal University, Xi'an 710119, China*)

( Received 2 October 2022; revised manuscript received 8 February 2023 )

## Abstract

Quantum information and artificial intelligence are the two most cutting-edge research fields in recent years, which have made a lot of progress in changing the traditional science. It has become a hot topic of research to realize the cross fusion of the two fields. Scholars have made many explorations in this field. For example, they have simulated the steady state and the dynamics of open quantum many-body systems. However, little attention has been paid to the problem of accurate representation of neural networks. In this paper, we focus on neural network representations of quantum mixed states. We first propose neural network quantum mixed virtual states (NNQMVS) and neural network quantum mixed states (NNQMS) with general input observables by using two neural network architectures, respectively. Then we explore their properties and obtain the related conclusions of NNQMVS and NNQMS under tensor product operation and local unitary operation. To quantify the approximation degree of normalized NNQMVS and NNQMS for a given mixed state, we define the best approximation degree by using normalized NNQMVS and NNQMS, and obtain the necessary and sufficient conditions for the representability of a general mixed state by using normalized NNQMVS and NNQMS. Moreover, we explore the types of mixed states that can be represented by these two neural network architectures and show their accurate neural network representations.

**Keywords:** neural network, quantum mixed state, local unitary operation, tensor product

**PACS:** 03.65.Aa, 03.65.Wj, 03.65.Ta, 03.65.Ud

**DOI:** 10.7498/aps.72.20221905

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12001480, 11871318, 12271325, 11971283), the Applied Basic Research Program of Shanxi Province, China (Grant Nos. 201901D211461, 20210302123082), the Excellent Doctoral Research Project of Shanxi Province, China (Grant No. QZX-2020001), and the PhD Start-up Project of Yuncheng University (Grant No. YQ-2019021).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [caohx@snnu.edu.cn](mailto:caohx@snnu.edu.cn)

## 量子混合态的两种神经网络表示

杨莹 曹怀信

### Two types of neural network representations of quantum mixed states

Yang Ying Cao Huai-Xin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 110301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20221905

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221905>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

基于Hardy-type佯谬的混合态高概率量子非局域关联检验

Testing quantum nonlocality with high probability using quantum mixed state based on hardy-type paradox

物理学报. 2019, 68(23): 230302 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191125>

基于物理信息神经网络的光斑质心计算

Calculation of spot centroid based on physical informed neural networks

物理学报. 2022, 71(20): 200601 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220670>

识别Z玻色子喷注的卷积神经网络方法

Tag Z boson jets via convolutional neural networks

物理学报. 2021, 70(6): 061301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201557>

利用神经网络识别高分子链在表面的吸附相变

Recognition of adsorption phase transition of polymer on surface by neural network

物理学报. 2019, 68(20): 200701 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190643>

基于深度残差网络的高精度自然转捩模拟方法

High-order natural transition simulation method based on deep residual network

物理学报. 2020, 69(20): 204701 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200563>

基于深度学习的光学表面杂质检测

Deep-learning-assisted micro impurity detection on an optical surface

物理学报. 2021, 70(16): 168702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210403>