

RAPORT TEHNIC SI STIINTIFIC IN EXTENSO
privind implementarea proiectului
Metode de invatare automata pentru rezolvarea problemelor
multi-particula in mecanica cuantica
Etapa II (2022)

**I. DESCRIEREA STIINTIFICA, CU PUNEREA IN EVIDENTA A REZULTATELOR ETAPEI ANUALE
SI GRADUL DE REALIZARE AL OBIECTIVELOR**

Obiectivul principal al proiectului este reprezentat de dezvoltarea tehnicilor de invatare automata (*machine learning, ML*) pentru rezolvarea eficienta a problemelor multi-particula. Exista o gama larga de probleme multi-particula care se pot incadra in domenii diverse, precum fizica nucleara sau fizica starii condensate. In cadrul proiectului vor fi discutate, cu precadere probleme relevante pentru teoria informatiei cuantice si aplicatii in nanotehnologie. In plus, metodele de tip ML dezvoltate pot fi pe mai departe adaptate pentru a fi utilizate si in alte domenii.

In mod concret, realizarea obiectivului general presupune atingerea unor tinte specifice care sunt abordate pe parcursul derularii proiectului. Un prim pas important este reprezentat de rezolvarea problemelor multi-particula din perspectiva modelelor continue, cat si din perspectiva atomistica, folosind teoria functionalei de densitate (*density functional theory, DFT*). Un numar mare de sisteme este rezolvat printr-o abordare de tip high throughput, care reprezinta exemple pentru dezvoltarea/aplicarea tehnicilor de tip ML. Apoi, sistemele cuantice sunt utilizate in probleme de transport, avand in vedere aplicatii in teoria informatiei cuantice si in nanotehnologie. Aceste rezultate vor servi in final la dezvoltarea unor dispozitive de tip neuron cuantic care poate fi incadrat in structuri complexe de tip retea neuronală.

Activitatile din cadrul Etapei II includ: implementarea unei scheme de tip high-throughput pentru generarea de exemple, utilizate in antrenarea retelelor neurale – sisteme atomistice investigate prin metoda DFT-NEGF si sisteme multi-particula investigate prin metoda diagonalizarii exacte (*exact diagonalization, ED*); aplicarea tehnicilor de invatare automata: etapa de antrenare, validare si test – sunt realizate mapari intre potentialele de confinare si densitatile de sarcina in starea fundamentala; analiza de post-procesare – datele de iesire sunt comparate cu valorile de referinta. La acestea se adauga aplicatii de teoria informatiei si aplicarea tehnicilor ML in stabilirea corelatiilor de pairing in sisteme supraconductoare.

Asadar, in continuare vor fi detaliate urmatoarele directii de studiu:

- Calcule atomistice de transport (high throughput) in sisteme quasi-1D investigate prin metoda DFT-NEGF; Evaluarea densitatilor de stari, a functiilor de transmisie si a conductatelor; Implementarea tehnicilor de invatare automata: retele neurale artificiale de tip *fully-connected*; Analiza de post-procesare: evaluarea erorilor in predictia conductantelor;
- Calcule de diagonalizare exacta (high throughput) in sisteme multi-particula investigate prin metoda ED; Implementarea tehnicilor de invatare automata: aplicarea metodei *pix2pix* pentru a realiza mapari intre potentialele

de confinare si densitatile de sarcina in starea fundamentala; Analiza de post-procesare: evaluarea erorilor in generarea densitatilor de sarcina;

- Aplicatii ale transiterii informatiei cuantice la distanta;
- Invatare automata in spatii reduse pentru emularea corelatiilor de pairing in sisteme supraconductoare.
- Alte aplicatii si rezultate preliminare.

Rezultatele privind generarea si rezolvarea unui set larg de sisteme *many-body*, precum si dezvoltarea/aplicarea tehnicilor de tip ML, relevante pentru obiectivele proiectului, sunt detaliate in continuare.

A. Calcule atomistice de transport in sisteme quasi-1D investigate prin metoda DFT-NEGF

In vederea dezvoltarii tehnicilor de tip ML pentru transport in sisteme cuantice atomistice consideram urmatorul studiu de caz, care contine elementele cheie pentru acest tip de abordare: generare de exemple prin calcule DFT-NEGF de tip high throughput, analiza densitatilor de stari, a functiilor de transmisie si a conductantelor, urmate de predictia proprietatilor de transport pentru diferite configuratii atomice. Intr-o prima etapa este generat un set extins de sisteme quasi-1D alcatuite din nanopanglici de fosforena cu defecte de tip vacanta, la care se ataseaza molecule de gaz in diferite configuratii extrase in prealabil din calcule de dinamica moleculara. Apoi, sunt investigate modificarile observate in functiile de transmisie si in conductantele sistemelor. In fine, datele structurale sunt utilizate pentru a realiza predictii asupra marimilor de interes, in particular conductantele sistemelor.

Sistemul fizic quasi-1D este descris in Fig. 1, fiind alcatuit dintr-o panglica de fosforena, in care defectele de tip vacanta creaza un centru de legatura pentru moleculele de gaz, in acest caz fiind considerate molecule de CO_2 . Nanopanglica este pasivata pe margini cu hidrogen, ceea ce ii confera proprietati semiconductoare, astfel incat defectele si prezenta moleculelor de CO_2 pot induce stari localizate care pot fi detectate cu o anumita amprenta in transport. Electrozii sunt constituiti din nanopanglici semi-infinite ne-pasivate, care confera caracter metalic [Sun et al., *RSC Adv.* 10,1400 (2020)]. Sistemele de tip nanopanglica cu defect sunt relaxate pana cand fortele reziduale sunt mai mici de 0.04 eV/Å.

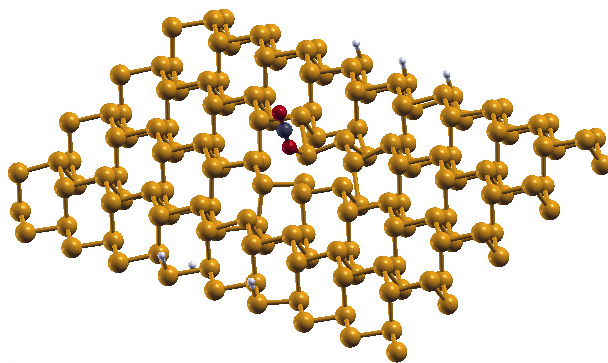


FIG. 1: Structura quasi-1D alcatuita dintr-un segment de nanopanglica de fosforena, cu terminatii zig-zag pasivate cu hidrogen. Un defect complex format din patru vacante punctiforme constituie un centru de legare pentru molecule de CO_2 . Electrozii sunt panglici semi-infinite, nepasivate, pentru a asigura caracterul metalic.

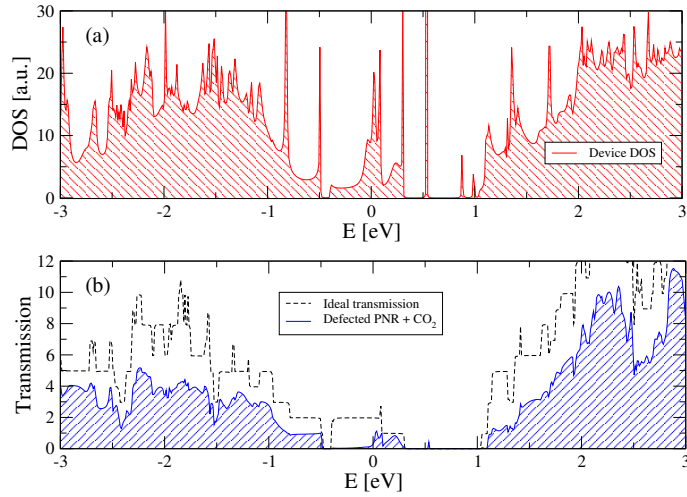


FIG. 2: (a) Densitatea de stari corespunzatoare regiunii centrale. (b) Functiile de transmisie pentru panglica ideala si pentru panglica cu defect luand in calcul o configuratie tipica a moleculei de CO_2 .

Calculule de transport de tip DFT-NEGF sunt implementate cu ajutorul pachetului SIESTA. Sistemul este partajat in 3 regiuni: electrod-1, regiunea centrala si electrod-2. Electrozii sunt sisteme quasis-1D semi-infinite, in cazul de fata fiind alcatuiti din panglici ne-pasivate de fosforena. Structura de benzi a acestora indica un caracter metalic. Regiunea de imprastiere contine defectul complex si molecula de CO_2 .

Sunt generate 1250 de sisteme, pornind de la pozitiile si configuratiile posibile ale moleculei de CO_2 : este delimitat un volum care contine $5 \times 5 \times 5$ site-uri si, pentru fiecare dintre acestea sunt considerate 10 orientari. Acestea sunt preluate dintr-un calcul de dinamica moleculara.

In baza acestor configuratii sunt generate functiile de transmisie $T(E)$. Pentru efectuarea eficienta a numarului mare de calcule de tip DFT-NEGF s-a procedat la distribuirea calculelor pe sistemul de calcul multi-core. Pe langa functiile de transmisie, au fost determinate densitatile de stari corespunzatoare regiunii centrale. Acestea sunt indicate in Fig. 2 pentru un sistem tipic.

Se observa o buna corelatie intre densitatea de stari si functia de transmisie. Nanopanglica de fosforena ideala pasivata prezinta un gap de ~ 1.5 eV. Acest gap este vizibil in functia de transmisie, adaugandu-se stari in interiorul acestuia, care corespund defectului si moleculei de gaz. Aceste stari localizate sunt influentate de pozitia si orientarea moleculei, asa cum se poate vedea in Fig. 3.

In baza functiilor de transmisie sunt calculate conductantele sistemelor:

$$G(T) = \frac{2e^2}{h} \int dE \left(-\frac{\partial f_{\text{FD}}}{\partial E} \right) T(E), \quad (1)$$

unde $f_{\text{FD}}(E; T)$ este distributia Femi-Dirac. Conductanta sistemului reprezinta unul elementele cheie pentru care este de interes o determinare eficienta si cu o buna acuratete.

Pentru predictia conductantelor sunt utilizate retele de tip *dense (fully connected)*, cu mai multe straturi ascunse, implementate in biblioteca TensorFlow. Vectorul de trasaturi este alcatuit din elemente structurale, usor de determinat: pozitiile relative ale atomilor din molecula de gaz (CO_2) relativ la pozitia defectului complex. In acest caz, avand 3 atomi si 3 coordonate carteziane, vectorul de trasaturi are dimensiunea 9. In cazuri mai complexe, in care sunt implicate mai multe tipuri de molecule, se pot adauga speciile atomice. Setul de exemple este impartit in urmatoarele

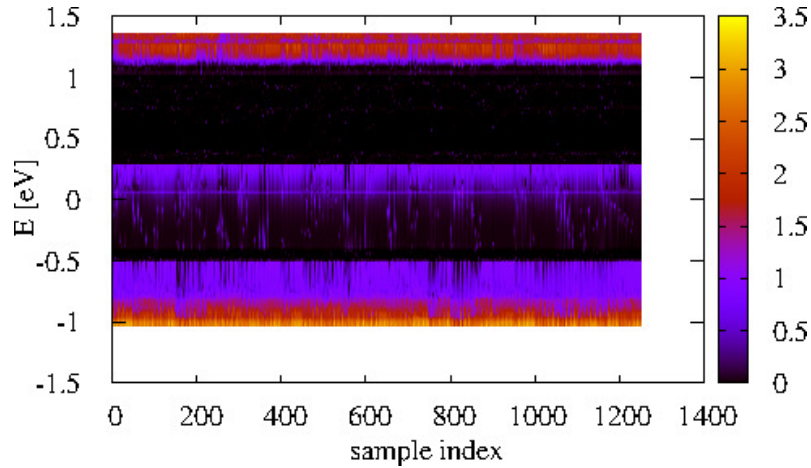


FIG. 3: Ansamblul funcțiilor de transmisie pentru fiecare sistem (poziții și orientări ale moleculelor de CO_2). Se pot identifica modificări în funcțiile de transmisie în jurul nivelului Fermi ($E=0$ eV)

componente: setul de antrenare, setul de validare și de test, ultimele două constituind 16-20% din setul total.

Rezultatele regresiei sunt indicate în Fig. 4. Pentru antrenare se obțin valori ale coeficientului de determinare $R^2 > 0.99$, în timp ce pentru test, valorile obținute pentru diferite arhitecturi sunt mai mici, $R^2 \sim 0.6$. În ciuda coeficientului R^2 mic pentru setul de test, un număr semnificativ de conductanțe sunt precise cu o bună acuratețe. Predicțiile imprecise, cu deviații mari, care contribuie la scăderea coeficientului R^2 sunt cu mare probabilitate generate de situații particulare în care funcțiile de transmisie prezintă variații puternice față de setul de bază (e.g. distanța dintre doi atomi devine prea mică). Aceste situații se pot identifica pe viitor prin analiza distribuției energiilor totale. De asemenea, corelarea densității de stări cu funcția de transmisie este de așteptat să aducă o contribuție semnificativă în predicția funcțiilor de transmisie și al conductanțelor.

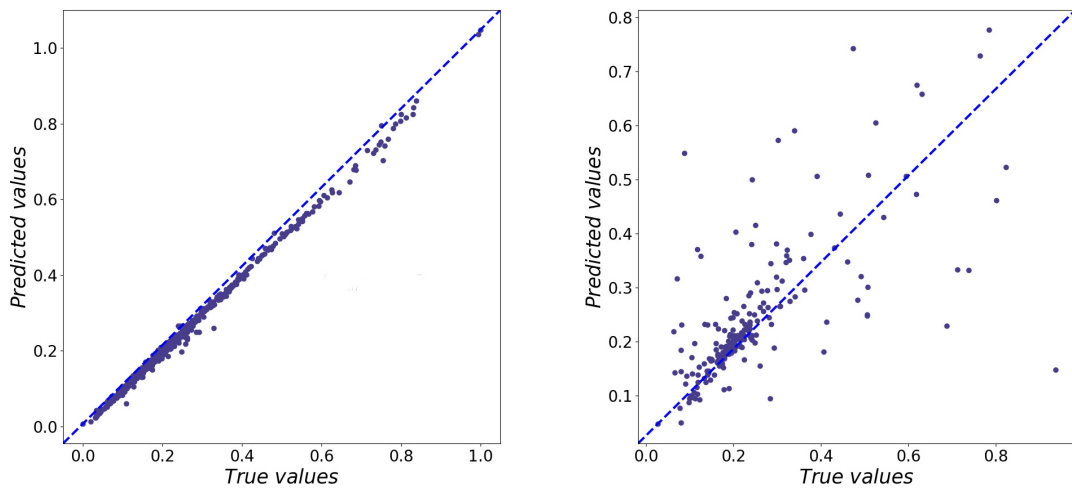


FIG. 4: Valorile (scalate) ale conductanțelor obținute cu o rețea neuronală artificială: valori precise vs. referință pentru setul de antrenare și setul de test.

Studiul poate fi extins pe viitor, urmărind diferite configurații ale defectului complex, determinarea energiilor de legătură a moleculelor de gaz relativ la nanopanglică, cât și investigarea regimului de tensiune finită.

B. Maparea densitatilor de sarcina in sisteme multi-particula utilizand diagonalizare exacta si metode de tip translatare de imagini

1. Introducere

Tehnicile de invatare automata si-au gasit aplicatii extinse in mai multe domenii de cercetare in ultimul deceniu, aducand o noua paradigma in stiinta, bazata pe analiza eficienta si versatila a datelor obtinute in urma experimentelor sau simularilor [1,2]. Modelele statistice si programarea de varf au condus la dezvoltarea tehnicilor de tip "deep learning", care rezolva problemele de *clustering*, regresie si clasificare [3]. In particular, in stiinta materialelor si nanotehnologie algoritmi de ML antrenati pe baza seturilor de date obtinute *a priori* au fost adaptati pentru o interpretare accelerata a datelor si pentru reducerea resurselor computationale necesare pentru design-ul de noi materiale [4,5] si dispozitive nanoelectronice [6,7]. Inteligenta artificiala s-a extins si la domenii mai teoretice din fizica starii condensate [8], cum ar fi tranzitiile de faza cuantice [9] sau prezicerea invariantilor topologici [10].

Fizica dispozitivelor nanoelectronice si domeniul informatiei cuantice se bazeaza in mare masura pe o descriere precisa si eficienta a stărilor multi-particula. In mod traditional, sistemele multi-particula au fost abordate prin teorii de camp mediu, cum ar fi aproximatia Hartree-Fock si teoria functionalei de densitate ("density functional theory" - DFT), aceasta din urma fiind utilizata in principal in contextul calculelor atomiste. Cu toate acestea, pentru aplicatiile care necesita descrieri la nivel de q-bit, depasind abordarea de tip camp mediu, sunt necesare metode computationale mai solicitante, cum ar fi metoda diagonalizarii exacte (*exact diagonalization*, ED) [11,12,13]. Stări de tip multi-particula au fost analizate anterior in sistemele de tip *quantum dots* (QDs) cu rețele de porți [14], unde creșterea exponențială a numărului de configurații ale tensiunii de poarta duce la un efort de calcul considerabil. Rezolvarea eficientă a unui număr mare de diagonalizări ale Hamiltonianului multi-particula este de obicei necesară în proiectarea dispozitivelor nanoelectronice, aceasta fiind o aplicatie potrivita pentru abordările de invatare automata.

Vizualizarea a fost intotdeauna o componenta esentiala pentru intelegerea si interpretarea datelor. In contextul starii condensate, o idee este utilizarea grafurilor ca mijloc de codificare a informatiiei despre structurile atomice si moleculare [15,16,17]. Odata cu dezvoltarea metodelor avansate de invatare automata, au fost creati algoritmi care sa faca predictii pe baza reprezentărilor brute, cum ar fi pixelii din cadrul unei imagini. Pentru acest domeniu particular, rețelele neuronale convolutionale ("Convolutional neural networks" - CNNs) s-au dovedit a fi relevante. In fizica materialelor, CNN-urile au fost utilizate pentru o varietate de aplicatii, de la predictia conductivității ionice a unui material ceramic din imagini [18] la predictia grupurilor spațiale a materialelor din care se produc filme subțiri din spectrele XRD [19]. De asemenea, se investeste mult in explicarea modului in care CNN-urile fac predictii exacte, in ciuda faptului ca acest tip de rețea face predictii in vaza părților separate ale unui obiect real, in timp ce in stiinta materialelor ne intereseaza mai mult distribuțiile statistice [20, 21].

Autoencoderele, care au CNN-uri incorporate in arhitectura lor, au fost folosite pentru a invata reprezentări de dimensiune redusa ale datelor, pe care apoi sa le incorporeze in algoritmi pentru predictii cu acuratete ridicata [22]. O alta tehnica de machine learning care este inca in curs de dezvoltare se bazeaza pe rețelele generative adversariale ("Generative Adversarial Networks" - GANs). Mai multe articole de cercetare s-au axat pe utilizarea GAN-urilor pentru sinteza microstructurilor [23, 24] si proiectarea materialelor, prin captarea caracteristicilor compusilor complecsi si invatarea unei mapari dintre variabilele latente si structura reala [25]. O alta arhitectura remarcabila care

este potrivită pentru procesarea imaginilor este rețeaua generativă adversarială condițională (cGAN), în care atât discriminatorul, cât și generatorul primesc informații suplimentare despre datele de intrare. Isola et al au propus un algoritm pentru prezicerea imaginilor cunoscut sub numele de `pix2pix`, care utilizează o arhitectură bazată pe rețeaua "U-Net" pentru generator și un clasificator convoluțional "Patch-GAN" pentru discriminator [26]. Avantajul acestui tip de algoritm este că învață o eroare care se adaptează la setul de date, deci poate fi aplicată la o gamă largă de sarcini. Acest tip de model este un instrument valoros în modelele care vizează îmbunătățirea calității imaginilor și creșterea vizibilității, cu posibile aplicații pentru sisteme supraveghere video sau de evitare a obstacolelor [27]. `pix2pix` este, de asemenea, deja utilizat în domeniul imagisticii medicale, cu scopul de a facilita colectarea seturilor de date de dimensiuni mai mari. De exemplu, Toda et al au folosit un model bazat pe `pix2pix` (StylePix2pix) pentru a genera imagini ale leziunilor din schițele tumorilor [28]. Mehmood et al au folosit algoritmul de translatăre a imaginilor pentru detectarea, colorarea și clasificarea imaginilor cu tumori [29], în timp ce Tahri et al au folosit Pix2Pix pentru a genera imagini CT sintetice cu aplicații în planificarea tehnicilor de radioterapie RMN [30]. În domeniul cercetării industriale, `pix2pix` a fost utilizat în scopul generării de imagini noi cu defecte de suprafață, relevante în producția de piese metalice [31]. Datorită popularității algoritmului, există un interes considerabil de a crește viteza de calcul și eficiența [32].

În Etapa II, am utilizat metoda `pix2pix` pentru a genera densități de sarcină pentru sisteme multiparticulate în starea fundamentală, pentru un set de sisteme cuantice bidimensionale generate aleatoriu. În procesul de antrenare, maparea este realizată între potențialele de confinare și densitățile de sarcină în starea fundamentală, în care se ia în calcul interacția Coulombiană. Sistemele cu interacție sunt rezolvate inițial prin metoda diagonalizării exacte, care necesită resurse computaționale extensive odată cu creșterea dimensiunii setului de sisteme analizate. Pe de altă parte, spectrul de energii și densitatea de sarcină pentru sistemul fără interacție pot fi obținute ușor din calculele uni-particulate. Folosind `pix2pix`, se pot genera eficient densitățile de sarcină în starea fundamentală pentru sisteme cu interacție noi.

Sistemele cuantice constau din N electroni confinați într-o configurație de potențial generată aleatoriu, definită pe o regiune pătrată bidimensională. Potențialele V_{xy} corespund grupurilor conectate de gropi cuantice circulare ("quantum wells" - QW) cu diferite raze. Aceste configurații de potențial seamănă cu sisteme de tip *quantum dots*, cum ar fi structuri de tip QDs bidimensionale alcătuite din grafena [33], structuri QDs distribuite aleatoriu pentru memristori [34] sau grafuri geometrice aleatorii alcătuite din QDs [35]. În plus, alegerea configurațiilor de potențial în mod aleatoriu asigură, de asemenea, o evaluare solidă a aplicabilității metodei `pix2pix`.

2. Sisteme analizate

Pentru a obține o distribuție echilibrată de gropi cuantice în configurația de potențial dată a fost luată în considerare următoarea schemă. Pornind de la un potențial constant, de tip treaptă, cu $V_s = 0.5$ eV, un număr de $N_{\text{qw}} = 25$ gropi cuantice sunt plasate în interiorul regiunii pătrate de dimensiune liniară $L = 30$ nm, având potențialul $V_0 = 0$ eV. Centrul fiecărei gropi de potențial, precum și raza acesteia sunt alese aleatoriu, în intervalul $L/16 < R < L/8$. Când se adaugă o nouă groapă de potențial, aceasta se poate suprapune parțial cu groapa de potențial curentă, dar nu mai mult de $3/4$ din suprafața sa. Dacă noua groapă de potențial nu este conectată cu groapa de potențial curentă, atunci aceasta este eliminată și o nouă poziție și rază sunt alese. Procesul continuă până când toate gropile de potențial sunt

plasate. În fine, dacă mai mult de 80% din suprafața L^2 este ocupată de gropi de potențial ($V_0 = 0$ eV), harta de potențial respectiva este eliminată și procesul este început din nou. În acest fel, un ansamblu de gropi de potențial conectate se formează, având un grad ridicat de variabilitate. Un număr total de $N_V = 5000$ de sisteme sunt generate.

3. Metoda `pix2pix`

Metoda dezvoltată de [Isola et al., doi:10.48550/ARXIV.1611.07004] utilizează o arhitectură de tip cGAN pentru precizarea imaginilor dintr-un set de imagini date. În mod similar cu alte abordări cGAN, arhitectura generator-discriminator din cadrul metodei `pix2pix` este realizată pentru a optimiza un obiectiv global, și anume ca imaginea generată să fie imposibil de distins față de imaginea de referință ("ground truth"). Cu toate acestea, principalele diferențe față de alte abordări de tip cGAN constau în utilizarea unei arhitecturi U-Net pentru generator și a unui PatchGAN pentru discriminator, care este mai sensibil la variații locale.

Folosim această abordare pentru a crea 3 mapări de tipul $\alpha \mapsto \beta$, după cum urmează: (i) $V_{xy} \mapsto \tilde{n}_0$, (ii) $V_{xy} \mapsto \tilde{n}_{\text{int}}$, (iii) $n_0 \mapsto \tilde{n}_{\text{int}}$, unde $V_{xy} = V(x, y)$ este potențialul de confinare, $n_0(x, y)$ și $\tilde{n}_0(x, y)$ sunt densitățile de sarcină reale și generate pentru sistemul fără interacție și $\tilde{n}_{\text{int}}(x, y)$ este densitatea de sarcină generată pentru sistemul cu interacție, care va fi comparată cu densitatea de sarcină calculată, $n_{\text{int}}(x, y)$.

Urmand abordarea standard `pix2pix`, generatorul G efectuează o mapare de la o imagine de intrare $\alpha \sim V_{xy}$ sau n_0 la o imagine $\beta \sim \tilde{n}_0$ sau \tilde{n}_{int} , cu excepția mapării triviale $n_0 \mapsto \tilde{n}_0$. De obicei, în procesul de generare a imaginii se adaugă în mod aleator un element de zgomot, notat cu γ , astfel încât putem descrie maparea generatorului ca $G : \{\alpha, \gamma\} \mapsto \beta$. Generatorul este antrenat pentru a produce imagini din ce în ce mai bune. Pe de altă parte, discriminatorul, D , este antrenat adversarial pentru a clasifica intrările pe care le primește de la generator ca *adevurate* sau *false*. Deoarece generatorul învață de obicei să ignore zgomotul γ , acesta este implementat sub forma de "dropout" în unele straturi, iar influența sa este, în general, neglijabilă.

Eroarea cGAN-ului este exprimată ca *binary cross entropy*:

$$\mathcal{L}_{\text{cGAN}}(G, D) = \mathbb{E}_{\alpha, \beta}[\log D(\alpha, \beta)] + \mathbb{E}_{\alpha, \gamma}[\log(1 - D(\alpha, G(\alpha, \gamma)))]. \quad (2)$$

Funcția obiectiv G^* este determinată în așa fel încât G încearcă să minimizeze $\mathcal{L}_{\text{cGAN}}$ și D încearcă să îl maximizeze și, în plus, este inclusă o funcție loss \mathcal{L}_{L_1} , reprezentând diferența dintre imaginile de referință:

$$G^* = \arg \min_G \max_D \mathcal{L}_{\text{cGAN}}(G, D) + \lambda \mathcal{L}_{L_1}(G). \quad (3)$$

Parameterul λ setează contribuția relativă dintre $\mathcal{L}_{\text{cGAN}}$ și \mathcal{L}_{L_1} în funcția loss.

Pentru a evalua diferența dintre imaginile generate și cele reale, notate cu β și β_{ref} , considerăm normele L_1 , L_2 și L_∞ , primele două fiind normate la numărul de puncte definite pe grid (pixeli).

$$\Delta\beta[L_1] = \frac{1}{N_x \times N_y} \|\beta - \beta_{\text{ref}}\|_1 \quad (4)$$

$$\Delta\beta[L_2] = \frac{1}{N_x \times N_y} \|\beta - \beta_{\text{ref}}\|_2 \quad (5)$$

$$\Delta\beta[L_\infty] = \|\beta - \beta_{\text{ref}}\|_\infty \quad (6)$$

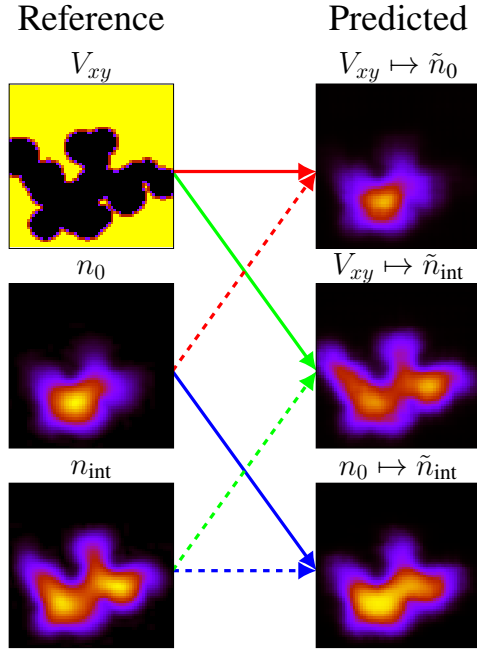


FIG. 5: Densitatile de sarcina din cazurile fara/cu interactie generate prin metoda pix2pix cGAN, pentru un sistem cuantic biparticula confinat intr-un potential V_{xy} : maparile (i) $V_{xy} \mapsto n_0$, (ii) $V_{xy} \mapsto \tilde{n}_{\text{int}}$, (iii) $n_0 \mapsto \tilde{n}_{\text{int}}$ sunt indicate prin sageti de culoare rosie, verde si albastra. Liniile continue indica maparile efective, in timp ce liniile punctate indica imaginile de comparat. In coloana din stanga avem imaginile marimilor definite pe grid: V_{xy} , n_0 , n_{int} . In coloana din dreapta, sunt prezentate imaginile generate: \tilde{n}_0 si \tilde{n}_{int} , ultima fiind determinata din V_{xy} sau n_0 .

Acuratetea de predictie pentru un set N_{sys} de perechi de imagini reale si generate, $\{(\beta_i, \beta_{\text{ref},i})\}$, poate fi descrisa de coeficientul de determinare R^2 , calculat din suma reziduala a patratelor, SS_{res} , si suma totala a patratelor, SS_{tot} :

$$R^2 = 1 - \frac{\text{SS}_{\text{res}}}{\text{SS}_{\text{tot}}}, \quad (7)$$

cu

$$\text{SS}_{\text{res}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{sys}}} \|\beta_{\text{ref},i} - \beta_i\|_2^2, \quad (8)$$

$$\text{SS}_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{sys}}} \|\beta_{\text{ref},i} - \bar{\beta}_{\text{ref},i}\|_2^2, \quad (9)$$

unde $\bar{\beta}_{\text{ref}} = \frac{1}{N_{\text{sys}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{sys}}} \beta_{\text{ref},i}$. In spatiul vectorial al cantitatilor definite pe grid $\{\beta_i\}$, definim $\beta_i \pm \beta_j$ ca o operatie de adunare sau scadere pixel cu pixel.

4. Arhitectura cGAN

Arhitectura de tip cGAN este definita de un numar de parametri care corespund retelei generatorului si discriminatorului. Pornim de la o configuratia initiala a retelei, pe care o numim *configuratie de referinta*, care este ulterior modificata si optimizata. Arhitectura cGAN translateaza marimi definite pe gridul de $N_x \times N_y = 64 \times 64$ pixeli,

mai exact potentialele si densitatile de sarcina. Generatorul are o configuratie de autoencoder-decoder, cu 6 straturi convolutive pentru "downsampling", la care se adauga alte 6 straturi deconvolutive de "upsampling", toate cu un pas ("stride") $S_G = 2$, care pastreaza dimensiunile imaginilor de intrare si iesire egale. Discriminatorul primeste doua perechi de imagini, imaginea de intrare + imaginea de referinta si imaginea de intrare + imaginea generata, care trebuie clasificate in "real" sau "fals". Arhitectura discriminatorului include 5 straturi convolutive cu o anumita secventa de pasi $S_D = (2, 2, 2, 1, 1)$, care reduce imaginea de intrare. Aceasta configuratie duce la o clasificare in real sau fals realizata pe mai multe zone ("patch classification"), iar dimensiunea acestei zone depinde de arhitectura discriminatorului. In acest caz, marimea zonei este de $N_{pt} \times N_{pt} = 70 \times 70$ de ori mai mare decat marimea imaginii, iar arhitectura cGAN este cunoscuta sub numele de ImageGAN. Daca reducem numarul de straturi din discriminator, dimensiunea zonelor scade $N_{pt} = 34, 16, 7, 4, 1$, cazul limita fiind $N_{pt} = 1$ si este cunoscut sub denumirea de PixelGAN. Dimensiunea kernelului pentru generator si discriminator este $\kappa = 4$.

5. Rezultate si discutii

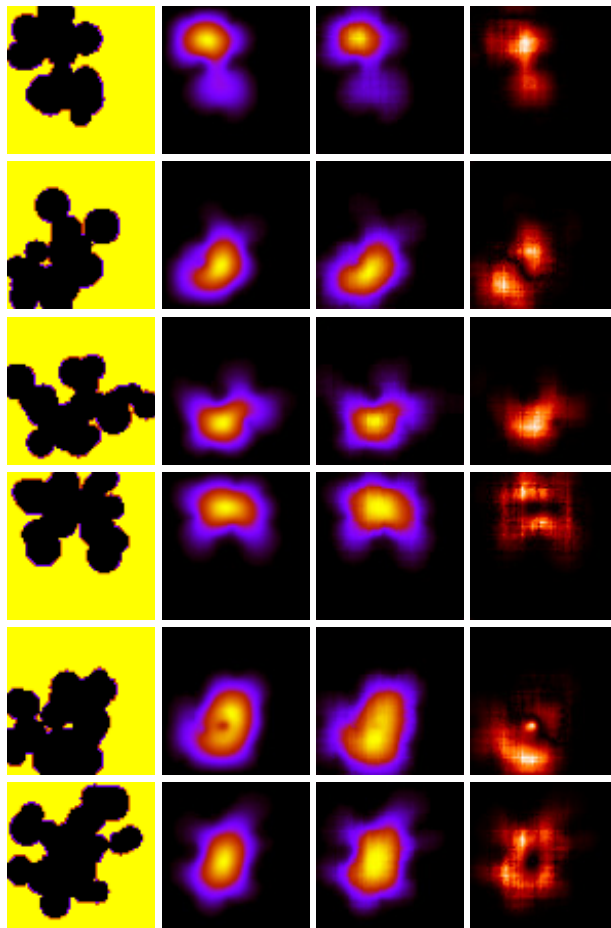


FIG. 6: Mapare *potential catre densitate fara interactie* ($V_{xy} \mapsto \tilde{n}_0$) pentru 10 sisteme alese aleator. Pe coloane sunt reprezentate: Potential, n_0 calculat, \tilde{n}_0 generat, Eroarea $|\tilde{n}_0 - n_0|_{(i,j)}$.

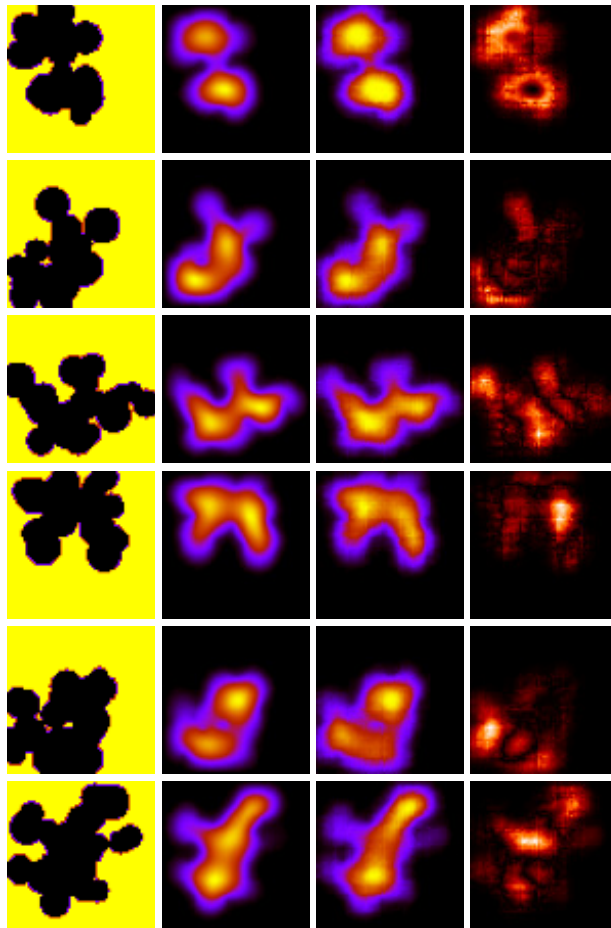


FIG. 7: Mapare *potential catre densitatea sistemului cu interactie* ($V_{xy} \mapsto \tilde{n}_{\text{int}}$) pentru 10 sisteme alese aleator. Pe coloane sunt reprezentate: Potential, n_{int} calculat, \tilde{n}_{int} generat, Eroarea $|\tilde{n}_{\text{int}} - n_{\text{int}}|_{(i,j)}$.

Sistemele cuantice considerate au doua particule confinate intr-un potential generat in mod aleator $\{V_{xy}\}$, folosind metoda descrisa in sectiunea IB2. Folosind configuratia cGAN de referinta, realizam trei mapari (i) $V_{xy} \mapsto n_0$, (ii) $V_{xy} \mapsto \tilde{n}_{\text{int}}$, (iii) $n_0 \mapsto \tilde{n}_{\text{int}}$, ilustrate in Fig. 5. Potentialele $\{V_{xy}\}$ sunt disponibile ca date de intrare, in timp ce densitatile de sarcina in cazul fara interactie $\{n_0\}$ sunt determinate in urma calculelor uni-particula. Densitatile de sarcina din cazul cu interactie, $\{n_{\text{int}}\}$, sunt determinate prin metoda diagonalizarii exacte, folosind starile uni-particula obtinute la pasul anterior. Primele doua mapari produc densitatile de sarcina direct din potentiale, a doua fiind cea mai importanta ($V_{xy} \mapsto \tilde{n}_{\text{int}}$), deoarece se obtine densitatea de sarcina in cazul cu interactie fara a utiliza diagonalizarea exacta. Al treilea tip de mapare foloseste ca date de intrare densitatile de sarcina din cazul fara interactie in locul potentialului si este realizata ca metoda de comparatie.

Daca evaluam cele trei mapari din Fig. 5 la nivel vizual, acestea reproduc destul de bine caracteristicile relevante ale densitatilor de sarcina de referinta. Intr-un calcul pentru sistemul fara interactie, densitatea de sarcina din starea fundamentala, n_0 , este localizata in regiunea din groapa de potential in care nivelul de confinare este mai slab, astfel incat energia cinetica este minima. In acest caz, cei doi electroni de spini opusi ocupa acelasi spatiu. Pe de alta parte, cand interactia Coulombiana este luata in calcul, densitatea de sarcina din starea fundamentala, n_{int} , este mai

delocalizata, fiind distribuita in groapa de potential de forma aleatoare. In mod calitativ, dsitributia n_{int} este data de competitia dintre energia cinetica mai mare din zonele cu confinare puternica si de interactia electrostatica dintre electronii din aceeasi regiune, intr-o zona in care nivelul de confinare este mai scazut. Figura 5 arata ca arhitectura de tip cGAN este capabila sa invete caracteristici netriviale ale sistemului cuantic, astfel incat imaginile de la intrare pot fi reproduse cu un grad mare de acuratete.

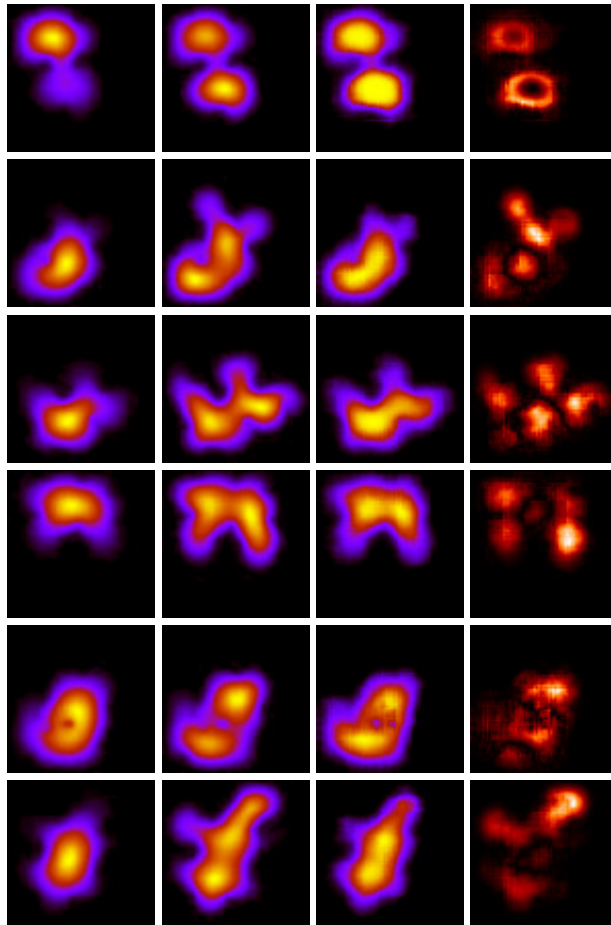


FIG. 8: Mapare *densitate sistem fara interactie catre densitate sistem cu interactie* ($n_0 \mapsto \tilde{n}_{\text{int}}$) pentru 10 sisteme alese aleator. Pe coloane sunt reprezentate: Potential, n_{int} calculat, \tilde{n}_{int} generat, Eroarea $|\tilde{n}_{\text{int}} - n_{\text{int}}|_{(i,j)}$.

In multe aplicatii de translatie imagine-imagine, de exemplu *harta* \mapsto *fotografie* sau invers, o validare calitativa este de obicei folosita. Evaluarea calitatii imaginilor generate sau comparatia cu imaginile reale nu este simpla. O abordare calitativa des folosita este indicele de similitudine structurala ("structural similarity index measure (SSIM)"), care ia in considerare luminozitatea, contrastul si componentele structurale ale imaginii. Pe de alta parte, in cazul de fata in care ne intereseaza sa mapam densitati de sarcina in sisteme cuantice, o comparatie mai stricta bazata pe normele L_1 , L_2 si L_∞ este mai potrivita si mai usor de interpretat. Norma L_1 ne da informatii despre cantitatea de sarcina deplasata in imaginea generata fata de imaginea de referinta, norma L_2 este asociata cu eroare patratica medie, iar L_∞ corespunde unei erori in maximului local in densitatile de sarcina.

Procesul de antrenare al retelei cGAN a fost realizat pe un numar mare $N_{\text{train}} = 4800$ de perechi de imagini, iar un

numar $N_{\text{val}} = 100$ si $N_{\text{test}} = 100$ de imagini distincte au fost folosite pentru validare si test. Desi in comparatie cu retele neuronale standard, in cazul retelelor cGAN procesul de validare nu este considerat necesar, putem observa o corelatie sistematica intre procesul de antrenare si alegerea unui set separat de date de validare. Aceasta observatie este utila mai ales in conditiile in care procesul de antrenare a retelei cGAN prezinta variatii abrupte ale erorii in functie de timpul. Corelatia dintre seturile de antrenare si validare ne ofera posibilitatea de a optimiza intervalul de antrenare (numarul de epoci) tinand cont de un criteriu de intrerupere al procesului.

Acuratetea modelului a fost evaluata folosind coeficientul de determinare R^2 generalizat pentru cazul in care sunt prezise marimi definite pe un grid de pixeli. Valorile tipice obtinute pentru R^2 depasesc 0.85. Mai multe arhitecturi de tip cGAN au fost investigate, iar performanta lor a fost evaluata evaluata. In figurile 6, 7 si 8 se poate observa acuratetea de predictie pentru diverse sisteme (potentiale de confinare).

C. Aplicatii ale transiterii inseparabilitatii cuantice la distanta

In cadrul proiectului sunt investigate stari multiparticula pentru a transmite informatie cuantica la distanta. Sunt investigate aplicatii in teoria informatiei cuantice, care pot fi ulterior modelate cu metodele dezvoltate (e.g. utilizand teoria de imprastiere bi-particula). Un prim rezultat obtinut se refera la o teorema care stabileste o relatie intre *concurrence* (care este o masura a inseparabilitatii) si fidelitatea maxima a teleportarii. O starea apartine clasei de stari numita X , daca matricea densitate asociata are elemente nenule numai de-a lungul diagonalei principale si antidiagonalei:

$$\rho_X = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{14} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0 \\ 0 & \rho_{32} & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{41} & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Am demonstrat urmatoarea teorema:

Teorema. Orice stare X inseparabila state caracterizata de $\rho_{23} = 0$ si $\rho_{22} = \rho_{33} < \frac{1}{4}$ poate fi folosita in teleportarea cuantica. Relatia dintre fidelitatea maxima a teleportarii si concurrence pentru astfel de stari este data de:

$$F_{\text{max}}(\rho_X) = \frac{2}{3} + \frac{1}{3} C(\rho_X). \quad (11)$$

Un al doilea rezultat important obtinut este acela in care se foloseste diseminarea asimetrica a unei stari bipartite inseparabile (asymmetric broadcasting of entanglement) pentru a genera doua stari finale inseparabile, care pot fi folosite apoi drept canale cuantice in teleportarea cuantica bidirectionala. Teleportarea cuantica bidirectionala consta in transmiterea informatiei purtate de qubiti de la un observator numit Alice catre un al doilea observator, Bob, si invers, adica de la Bob catre Alice. Inseparabilitatea cuantica este o resursa valoroasa utila in teoria procesarii cuantice. Important este sa folosim o singura starea bipartita inseparabila in cat mai multe procese.

In acest proiect aratam cum putem folosi o singura starea inseparabila impartita intre Alice si Bob:

$$|\psi\rangle_{a_1 b_1} = \alpha|00\rangle + \beta|11\rangle, \quad (12)$$

pentru a realiza teleportarea cuantica bidirectionala. Cei doi observatori separati spatia aplica fiecare local o masina

de clonat asimetrica, starea initiala totala fiind starea unui sistem cu sase particule, obtinand in final starile:

$$\rho^{a_1 b_1} = \frac{1}{(1+p^2+q^2)^2} \begin{pmatrix} |\alpha|^2(1+p^2)^2 + |\beta|^2q^4 & 0 & 0 & 4\alpha\beta^*p^2 \\ 0 & q^2(1+p^2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q^2(1+p^2) & 0 \\ 4\alpha^*\beta p^2 & 0 & 0 & |\beta|^2(1+p^2)^2 + |\alpha|^2q^4 \end{pmatrix}; \quad (13)$$

$$\rho^{a_2 b_2} = \frac{1}{(1+p^2+q^2)^2} \begin{pmatrix} |\alpha|^2(1+q^2)^2 + |\beta|^2p^4 & 0 & 0 & 4\alpha\beta^*q^2 \\ 0 & p^2(1+q^2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p^2(1+q^2) & 0 \\ 4\alpha^*\beta q^2 & 0 & 0 & |\beta|^2(1+q^2)^2 + |\alpha|^2p^4 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Mai departe evaluam concurence pentru cele doua stari si ilustram in Fig. 9 dependenta acestora de parametrii $|\alpha|$ (care caracterizeaza starea initiala) si p (care descrie masina de clonat locala).

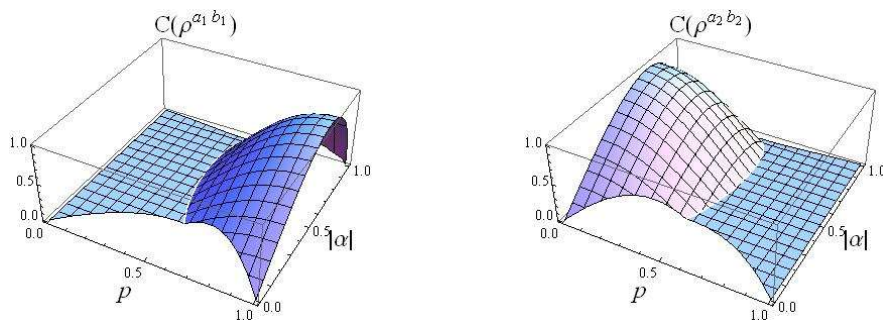


FIG. 9: Concurence al starilor finale $\rho^{a_1 b_1}$ (stanga) si $\rho^{a_2 b_2}$ (dreapta) obtinute folosind masina de clonat asimetrica locala.

Mai departe am studiat ce se intampla in cazul in care, in procesul de diseminare a inseparabilitatii, se foloseste o masina de clonat asimetrica nelocala. In Fig. 10 aratam comportarea lui concurence pentru starile $\rho^{a_1 b_1}$ si respectiv $\rho^{a_2 b_2}$.

Comparand concurence in cele doua scenarii folosite: masina de clonat locala vs. nelocala, am demonstrat analitic ca:

$$\begin{aligned} C(\rho_{\text{nonloc}}^{a_1 b_1}) &> C(\rho_{\text{loc}}^{a_1 b_1}) \\ C(\rho_{\text{nonloc}}^{a_2 b_2}) &> C(\rho_{\text{loc}}^{a_2 b_2}). \end{aligned} \quad (15)$$

Folosind Teorema gasita de noi, am demonstrat ca toate starile inseparabile $\rho^{a_1 b_1}$ si $\rho^{a_2 b_2}$, obtinute atat in diseminarea locala, cat si in cea nelocala, pot fi folosite drept canale cuantice in teleportarea cuantica, adica pot fi folosite simultan in teleportarea bidirectionala. In Fig. 11, desenam fidelitatea teleportarii atunci cand $\rho^{a_1 b_1}$ si $\rho^{a_2 b_2}$, gasite prin metoda diseminarii locale, sunt canale cuantice. Mai departe, in Fig. 12, ilustram dependenta fidelitatii teleportarii de parametrii $|\alpha|$ si p pentru situatia cand starile finale au fost obtinute in procesul de diseminare nelocala.

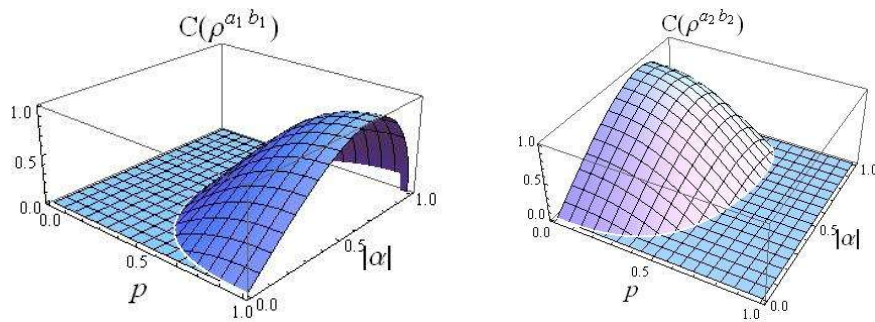


FIG. 10: Concurrence al starilor finale $\rho^{a_1 b_1}$ (stanga) si $\rho^{a_2 b_2}$ (dreapta) obtinute folosind masina de clonat asimetrica nelocala.

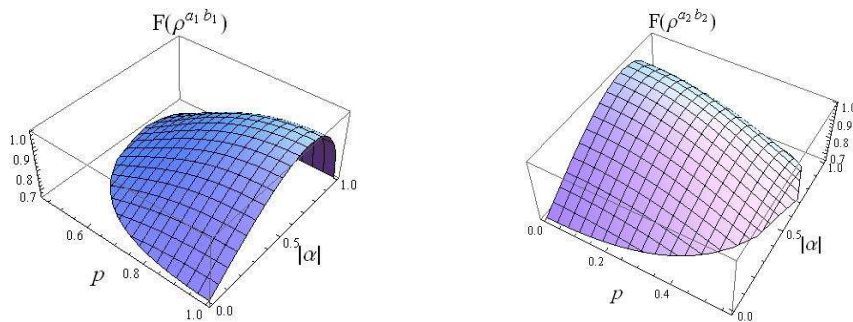


FIG. 11: Fidelitatea teleportarii, cand starile $\rho^{a_1 b_1}$ si $\rho^{a_2 b_2}$, generate de diseminarea locala, sunt folosite drept canale cuantice.

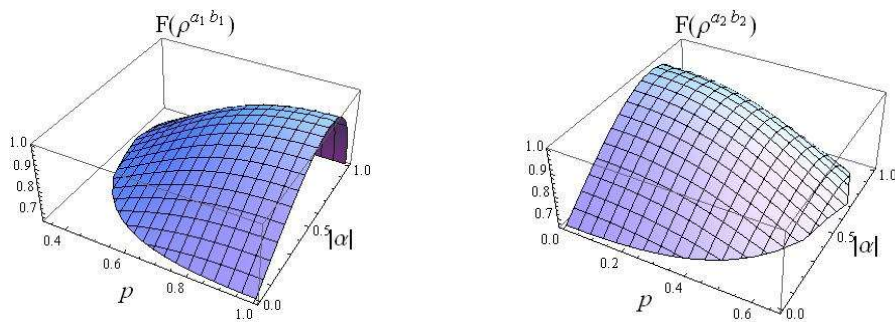


FIG. 12: Fidelitatea teleportarii, cand starile $\rho^{a_1 b_1}$ si $\rho^{a_2 b_2}$, generate de diseminarea nelocala, sunt folosite drept canale cuantice.

In plus, am demonstrat ca starile obtinute prin diseminarea nelocala conduc la o fidelitate a teleportarii mai mare decat in cazul starilor generate de diseminarea locala:

$$F_{\max}(\rho_{\text{nonloc}}^{a_1 b_1}) > F_{\max}(\rho_{\text{loc}}^{a_1 b_1})$$

$$F_{\max}(\rho_{\text{nonloc}}^{a_2 b_2}) > F_{\max}(\rho_{\text{loc}}^{a_2 b_2}).$$

O alta masura a corelatiei cuantice, folosita intens in teoria informatiei cuantice, este discordul cuantic. In general, aceasta marime nu poate fi calculata analitic. Noi am investigat numeric discordul cuantic al starilor finale obtinute in diseminarea locala a inseparabilitatii. Am gasit un rezultat interesant, si anume: discordul cuantic este mai mare decat concurrence.

D. Invatare automata in spatii reduse pentru emularea corelatiilor de pairing in sisteme supraconductoare

Sistemele supraconductoare puternic corelate sunt des intalnite in diverse domenii ale fizicii fundamentale, precum materia condensata, fizica nucleara sau chimia cuantica. Descrierea acestora in cadrul mecanicii cuantice este extrem de dificila atat din punct de vedere formal, cat si computational, ceea ce a dus la formularea de emulatori eficienti ale caror predictii merg dincolo de ceea ce este posibil folosind calcule directe [M. F. Kasim et al, *Building high accuracy emulators for scientific simulations with deep neural architecture search*, Mach. Learn.: Sci. Technol. 3, 015013 (2021)]. Recent, metoda Eigenvector Continuation (EC) a fost introdusa in [D. Frame et al, *Eigenvector Continuation with Subspace Learning*, Phys. Rev. Lett. 121, 032501 (2018)] ca un emulator capabil de interpolari si extrapolari eficiente ale starilor extreme ale unui Hamiltonian definit de unul sau mai multi parametri. EC a fost folosit cu succes in diverse studii de fizica nucleara ca emulator de imprastieri si reactii nucleare, pentru a accelera modelul in paturi nuclear sau pentru a re-organiza teoria perturbatiilor.

Recent, abordarea EC a fost recunoscuta ca fiind o instanta a clasei de Metode de Baze Reduse (eng., Reduced Basis Methods, RBM), la randul lor parte a cadrului general de Modele de Ordin Redus (eng., Reduced Order Models). Simultan, ideea de a folosi RBM in contextul problemelor de vectori si valori proprii a fost independent redescoperita si aplicata pentru a reconstrui diagrama de faza pentru diverse sisteme de spin. Dat fiind ca RBM au fost introduse abia in anii recenti pentru studiul sistemelor cuantice de mai multe corpuri, aplicabilitatea lor ramane a fi testata in diverse circumstante. In cele ce urmeaza, vom evalua performantele EC/RBM in a emula corelatiile cuantice induse de interactia de pairing in sisteme finite, precum nuclee atomice sau insule supraconductoare in cadrul materiei condensate.

Succesul metodei EC/RBM se bazeaza pe faptul ca evolutia neteda a starilor fizice in cadrul spatiului de parametri este adesea limitata la un subspatiu de dimensiune foarte scazuta (in comparatie cu dimensiunea spatiului Hilbert total). Astfel, un numar mic de solutii “exacte” ale problemei considerate (obtinute cu o metoda computationally adecvata, inasa de obicei costisitoare) poate fi suficient pentru a alcatui o baza de stari a subspatiului redus.

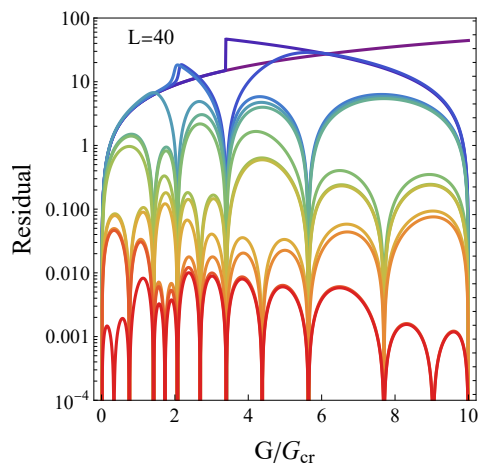
In cadrul RBM urmarim realizarea unei reprezentari efective de dimensionalitate redusa $\psi^{(\text{rb})}(\boldsymbol{\xi})$ pentru starea fundamentala a Hamiltonianului $\mathcal{H}(\boldsymbol{\xi})$ suficient de precisa in domeniul de parametri $\boldsymbol{\xi}$ de interes, folosind un numar relativ mic N_{rb} de puncte de sampling $\boldsymbol{\xi}_k$ unde solutiile “exacte” $\psi_k^{(\text{ex})}$ sunt calculate, $|\psi^{(\text{rb})}(\boldsymbol{\xi})\rangle = \sum_{k=1}^{N_{\text{rb}}} c_k(\boldsymbol{\xi}) |\psi_k^{(\text{ex})}\rangle$. Coeficientii dezvoltarii $c_k(\boldsymbol{\xi})$ pentru orice valori ale parametrilor sunt determinati prin rezolvarea problemei de vectori si valori proprii generalizate pentru $h_{k\ell}(\boldsymbol{\xi}) = \langle \psi_k^{(\text{ex})} | \mathcal{H}(\boldsymbol{\xi}) | \psi_\ell^{(\text{ex})} \rangle$ in baza non-ortogonala $\psi^{(\text{ex})}$, $h c = E^{(\text{rb})} S c$, scrisa in termeni de matricea de overlap $S_{k\ell} \equiv \langle \psi_k^{(\text{ex})} | \psi_\ell^{(\text{ex})} \rangle$.

Pentru o determinare eficienta a punctelor de sampling, folosim un protocol de invatare automata bazat pe o estimare rapida a erorii de emulare [A. Sarkar, D. Lee, *Self-learning emulators and eigenvector continuation*, Phys. Rev. Res. 4, 023214 (2022)]. In aceasta faza cunoscuta in literatura sub denumirea de “emulare offline”, baza redusa este construita iterativ prin repetarea a doi pasi. Primul pas consta in evaluarea peste intreg spatiul de parametri a

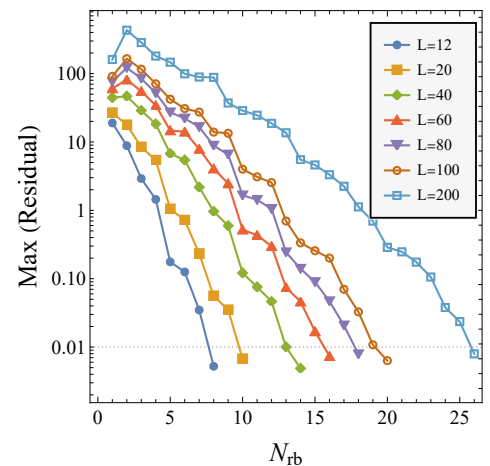
Rezidualului

$$\text{Res}(\boldsymbol{\xi}) \equiv \left\| \mathcal{H}(\boldsymbol{\xi})|\psi^{(\text{rb})}(\boldsymbol{\xi})\rangle - E^{(\text{rb})}(\boldsymbol{\xi})|\psi^{(\text{rb})}(\boldsymbol{\xi})\rangle \right\|, \quad (16)$$

care cuantifica precizia cu care ecuatia Schrödinger exacta este satisfacuta de solutia aproximativa curenta $\psi^{(\text{rb})}$. Remarcam aici ca numai informatia emulata este necesara in acest pas, nefiind nevoie de nicio noua evaluare “exacta” folosind metode computationale costisitoare (care ar contraveni scopului emularii). Maximul Rezidualului peste intreg spatiul de parametri indica regiunea unde emularea este cel mai putin precisa si implicit unde ar beneficia cel mai mult de un nou punct de sampling. La aceasta locatie, in pasul doi, calculam o noua solutie “exacta” si includem vectorul rezultat in baza redusa. Acesti pasi sunt repetati pana eroarea emularii (cuantificata de Rezidualul definit anterior) scade sub o valoare de prag suficient de mica.



(a) Evolutia Rezidualului definit in Ec. (16) in cadrul algoritmului de invatare automata al emulatorului RBM.



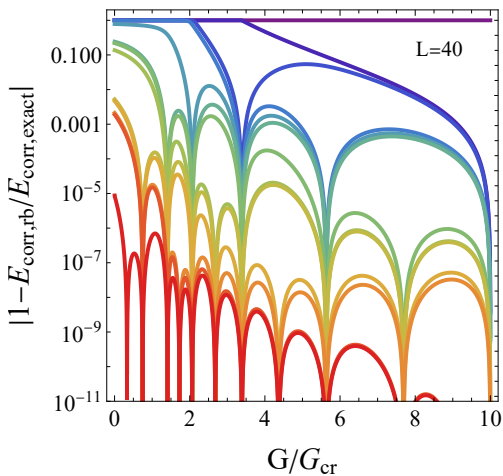
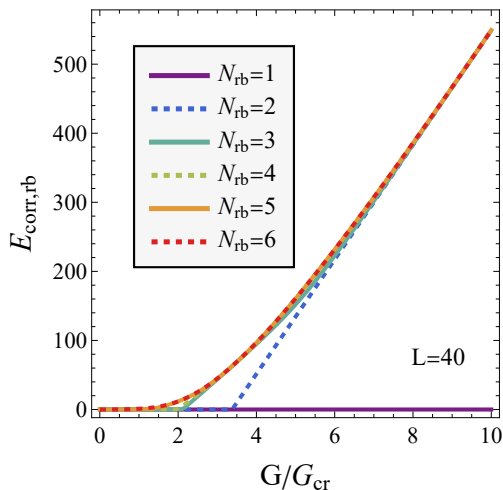
(b) Evolutia Maximului Rezidualului definit in Ec. (16) in cadrul algoritmului de invatare automata al emulatorului RBM pentru diverse marimi ale sistemului.

FIG. 13

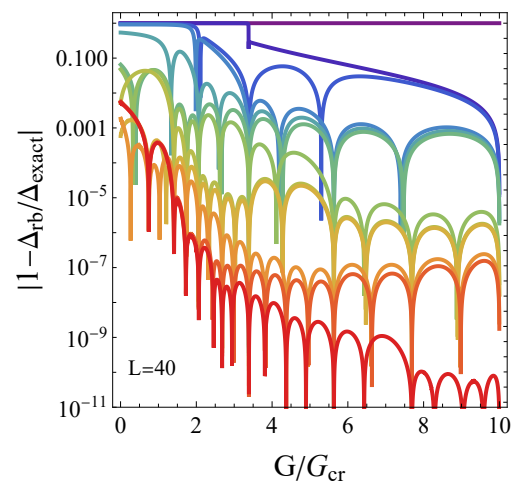
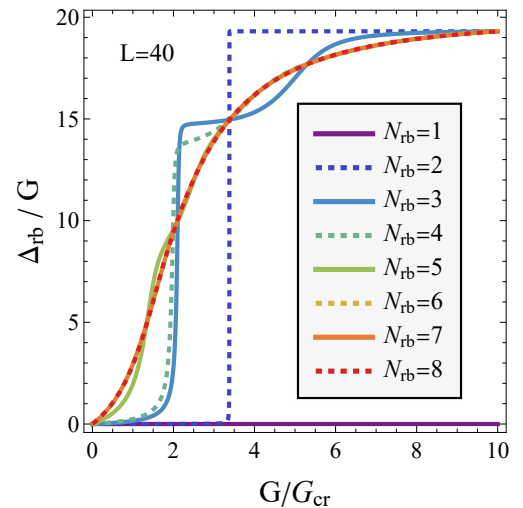
Consideram sistemele supraconductoare de interes ca fiind descrise de Hamiltonianul de pairing

$$H(G) \equiv \sum_{i=1}^L \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \epsilon_i c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} - G \sum_{i,j=1}^L c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}^\dagger c_{j,\downarrow} c_{j,\uparrow} \equiv \sum_{i=1}^L \epsilon_i N_i - G \sum_{i,j=1}^L P_i^\dagger P_j, \quad (17)$$

unde i indica una din cele L perechi de nivele uniparticula conjugate avand $\epsilon_i = \epsilon_{i,\uparrow} = \epsilon_{i,\downarrow}$ si G este taria interactiei de pairing. In cele ce urmeaza, vom considera nivele uniparticula distribuite uniform cu spatiere $\epsilon = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$. In absenta interactiei starea fundamentala se reduce la forma Hartree-Fock $|\text{HF}\rangle = \prod_{i=1}^{N_p} P_i^\dagger |0\rangle$, unde N_p este numarul de perechi din sistem. Regimul de pairing slab $G \ll \epsilon$ poate fi descris intr-o buna aproximatie de o stare variationala de tip Coupled-Cluster bazata pe excitatii coerente particula-gol [V. V. Baran, J. Dukelsky, Phys. Rev. C 103, 054317 (2021)], $|\psi\rangle \simeq \exp \left[\sum_{ij} z_{ij} P_i^\dagger P_j \right] |\text{HF}\rangle$. Limita opusa $G \gg \epsilon$ este exact descrisa de un condensat de perechi colective $|\psi\rangle = \left(\sum_{i=1}^L P_i^\dagger \right)^{N_p} |0\rangle$. In Fig. 1a demonstram capacitatea RBM de a descrie eficient tranzitia de



(a) Evolutia Energiei de corelatie emulata cu ajutorul RBM (chenar superior), precum si eroarea acesteia relativa la valoarea sa exacta (chenar inferior).



(b) Evolutia gap-ului canonic emulat cu ajutorul RBM (a), precum si eroarea acesteia relativa la valoarea sa exacta (b).

FIG. 14

la regimul de pairing slab dominat de excitatii particula-gol la regimul de pairing tare dominat de perechi colective. Pe de o parte, este de remarcat scaderea exponentiala a rezidualului in cadrul algoritmului de invatare automata al emulatorului RBM. Pe de alta parte, complexitatea emulatorului (dimensiunea minima a bazei reduse necesara atingerii unei precizii date a emularii) creste aproximativ liniar cu dimensiunea sistemului, dupa cum reiese din Fig. 1b.

Calitatea algoritmului de invatare automata poate fi evaluata in diverse metrici. Ca o prima alegere folosim energia de corelatie $E_{\text{corr}}(G) \equiv E_{\text{HF}}(G) - E(G)$, unde $E_{\text{HF}}(G)$ este energia starii Hartree-Fock. E_{corr} masoara cantitativ corelatiile cuantice descrise de metoda curenta dincolo de cele ale starii Hartree-Fock, fiind sensibila a structura starii alese in special in regimul de pairing slab. Dupa cum rezulta din Fig. 2b, erorile energiei de corelatie

(relative la valoarea sa exacta) au o pronuntata scadere exponentiala in cadrul algoritmului de invatare automata. Ca o a doua metrica pentru convergenta algoritmului de invatare automata a emulatorului RBM, consideram gap-ul canonic $\Delta = G \sum_{i=1}^L \sqrt{n_i(1-n_i)}$, unde $n_i = \langle N_i \rangle / 2$ indica probabilitatea de ocupare a fiecarui nivel i . Datorita dependentei acestuia de probabilitatile de ocupare, aceasta cantitate este mai sensibila la structura functiei de unda considerate decat energia de corelatie. Evolutia gap-ului canonic este prezentata in Fig. 2b, prezentand o convergenta rapida (exponentiala) la valoarea exacta, de aceasta data insa intr-un mod oscilatoriu.

Succesul emularii RBM a Hamiltonianul de pairing este incurajator pentru a accelera modelarea de sisteme supraconductoare mai complexe, precum suprafluide topologice sau nano-dispozitive hibride supraconductor-semiconductor in cadrul materiei condensate, sau sisteme proton-neutron in interactie in cadrul fizicii nucleare.

E. Alte aplicatii si rezultate preliminare

Investigatiile preliminare asupra retelelor neurale artificiale si-au gasit aplicatii in interpolarea unei regiuni locale cu un anumit comportament in spatiul fazelor, lucrarea "*Tachyonic cosmology with cubic contractions of the Riemann tensor*" (M. Marciu) fiind acceptata spre publicare in European Physical Journal C.

De asemenea, in studiul sistemelor puternic corelate sunt de interes structuri periodice care pun in evidenta benzi plate (*flat bands*), care corespund unor stari topologice. Ca studiu de caz, au fost considerate retele Lieb intr-un *model continuu* cu conditii periodice, pornind de la metodologia de calcul a functiilor uni-particula pe domeniu finit din lucrarea recent publicata [G.A. Nemnes *et al.* Physica Scripta 97 055813 (2022)]. Site-urile retelei Lieb corespund unor gropi de potential circulare, a caror forma se pot ajusta. Astfel, reseaua Lieb poate fi reconfigurata, cu *variatie continua*, intr-o retea de tip Kagome. Rezultatele au fost prezentate la conferinta internationala Northern Lights Conference 22.

II. SUMAR AL PROGRESULUI (LIVRABILE REALIZATE, INDICATORI DE REZULTAT, DISEMINAREA REZULTATELOR)

In cadrul etapei II au fost realizate urmatoarele livrabile: scheme de tip *high throughput* atat pentru sisteme bi-particula in model continuu, cat si pentru modele atomistice de transport modelate prin metoda DFT-NEGF – coduri in limbaj C, script-uri bash; sunt dezvoltate programe in limbaj Python, folosind librariile TensorFlow pentru implementarea tehnicilor de tip ML – metoda `pix2pix` si retele neurale de tip *fully-connected*; aplicatii in teoria informatiei cuantice – transmiterea inseparabilitatii cuantice la distanta; metoda de tip ML pentru Hamiltonianul de pairing – aplicatii la sisteme supraconductoare.

Dezvoltarea tehnicilor de invatare automata a fost focalizata indeosebi pe abordarea de tip *image translation*, care, prin metoda `pix2pix` ofera rezultate importante pentru predictia densitatii de sarcina in sisteme cuantice cu interactie. Abordarea de tip ML in cadrul sistemelor atomistice indica rezultate promitatoare care pot fi imbunatatite prin augmentarea setului de trasaturi (e.g. prin includerea informatiei legate de densitatea de stari). De asemenea, aplicatiile in teoria informatiei cuantice dezvoltate la modul abstract se pot implementa folosind teoria de imprastiere. Unul din sistemele considerate corespunde unui sistem de tip *quantum sorter* (lucrare in pregatire). Au fost considerate si alte sisteme *many-body* (sisteme supraconductoare) pentru care au fost dezvoltate tehnici de

invatare automata in spatii reduse pentru emularea corelatiilor de pairing.

Pe langa cele doua lucrari deja publicate in Etapa I, ca indicatori de rezultat, in Etapa II au fost redactate 6 lucrari (tinta fiind 4 lucrari), dintre care doua sunt deja publicate, doua sunt in evaluare si doua sunt pregatite pentru a fi trimise spre publicare pe durata derularii Etapei II.

Lucrari publicate:

- Iulia Ghiu, "The quantum affinity of qubits subjected to noisy quantum channels", Rom. Rep. Phys. 73, 119 (2021). [Etapa I]
- D.V. Anghel, A.T. Preda, G.A. Nemnes, "The R-matrix formalism for two-particle scattering problems", Phys. Lett. A 425, 127865 (2022). [Etapa I]
- G.A. Nemnes, T.L. Mitran, A.T. Preda, I. Ghiu, M. Marciu, A. Manolescu, "Investigation of bi-particle states in gate-array-controlled quantum-dot systems aided by machine learning techniques", Physica Scripta 97 055813 (2022).
- M. Marciu, "Tachyonic cosmology with cubic contractions of the Riemann tensor", European Physical Journal C 82, 1069 (2022).

Lucrari trimise spre publicare:

- I. Ghiu, C. Cirneci, G.A. Nemnes, "Bidirectional quantum teleportation based on asymmetric broadcasting of entanglement", Quantum Information Processing, submitted (2022).
- C. Cirneci, I. Ghiu, "Analysis of Quantum Correlations Obtained Using Local Optimal Universal Asymmetric Cloners", Entropy, submitted (2022).

Lucrari pregatite pentru a fi trimise spre publicare:

- C.-A. Pantis-Simut, A. Preda, L. Ion, A. Manolescu, G.A. Nemnes, "Mapping confinement potentials and charge densities of interacting quantum systems using `pix2pix`", to be submitted (2022)
- V.V. Baran, D. Nichita, "Reduced basis emulation of pairing in finite systems", to be submitted (2022)

Lucrari in pregatire:

- A.T. Preda *et al.*, "A probabilistic quantum sorter for mode-lead disentangling using Rashba spin-orbit coupling"

Diseminarea rezultatelor s-a realizat in cadrul a trei conferinte internationale (tinta fiind 2 participari), dupa cum urmeaza:

Participari la conferinte internationale:

- A.T. Preda *et al.*, *Machine learning techniques applied to many-particle states in quantum dot systems*, IBWAP 12-15 Iulie 2022.
- V.V. Baran *et al.*, *Emulating superconducting pairing correlations in finite systems*, IC-MSQUARE 5-8 Septembrie 2022.
- A.T. Preda *et al.*, *Tuning electronic band structure properties in Lieb-like lattices*, Northern Lights Conference 22, 12-15 Octombrie 2022.

III. REZUMAT EXECUTIV AL ACTIVITATILOR REALIZATE

In cadrul Etapei II (2022) sunt continuate investigatiile demarate in prima etapa, respectiv investigarea problemelor multi-particula cu ajutorul metodelor de invatare automata (*machine learning*, ML), precum si dezvoltarea de noi aplicatii in cadrul teoriei informatiei.

Sunt analizate probleme de imprastiere avand la baza modele atomistice, utilizand metoda DFT-NEGF (*density functional theory – non-equilibrium Green’s function*), care constituie exemple in vederea dezvoltarii si testarii tehnicilor de invatare automata pentru design-ul de nanodispozitive (abordare de tip DFT-NEGF-ML). In cadrul acestei activitati a fost generata schema de tip *high throughput* pentru determinarea densitatilor de stari si a functiilor de transmisie pentru un numar de 1250 de sisteme, punandu-se in evidenta corelatiile dintre aceste doua marimi. Au fost prelucrate datele structurale si au fost determinate conductantele pentru diferite temperaturi, care constituie input si, respectiv, valori tinta (output) pentru retele neurale de tip *fully-connected*. Acestea au fost implementate folosind biblioteca Tensorflow, iar rezultatele sunt incurajatoare si deschid posibilitatea unor investigatii care au in vedere vectori de trasaturi cu un grad mai mare de complexitate (e.g. pornind de la structura densitatilor de stari).

In continuare, sunt dezvoltate studiile pe sisteme multi-particula calculate prin metoda diagonalizarii exacte (*exact diagonalization*, ED), avand in vedere un set larg de 5000 sisteme cu potential de confinare aleator. In cadrul acestei teme, sunt realizate mapari intre potentialele de confinare si densitatile de sarcina in starea fundamentala, utilizand metode de tip *image-translation*. Implementarea este realizata prin intermediul retelelor conditionale generativ-adversative (*conditional generative adversarial networks*, cGANs) implementate in metoda *pix2pix*. Astfel, sunt evitate calculele de diagonalizare exacta, abordarea de tip ED-ML avand o buna acuratete de predictie.

De asemenea, sunt continuate studiile privind aplicatii ale starilor entanglate in comunicare cuantica. Aceste rezultate pot fi pe mai departe utilizate pentru descrierea unor dispozitive bazate pe transmiterea inseparabilitatii cuantice la distanta (e.g. pentru stari bi-particula).

Sunt dezvoltate studii privind utilizarea tehnicilor ML pentru emularea corelatiilor de pairing in sisteme supra-conductoare. Este utilizata metoda *Eigenvector Continuation* ca un emulator capabil de interpolari si extrapolari eficiente ale starilor extreme ale unui Hamiltonian definit de unul sau mai multi parametri.

In sumar, in cadrul Etapei II au fost dezvoltate metode de tip ML, care rezolva eficient si cu o buna acuratete o serie de probleme *many-body*, intre acestea numarandu-se retelele neurale artificiale, metoda de tip *image-translation pix2pix* si *Eigenvector Continuation*.

Pagina web proiect: <http://solid.fizica.unibuc.ro/~nemnes/QuanticLearn>

Director de proiect, Dr. George Alexandru Nemnes