

Квантовый Канал
как
Классическая Вычислительная Модель

Владислав Малышкин

Прямая Задача Квантовой Механики

Задан Гамильтониан H найти волновую функцию во времени. Стационарный случай основного состояния.

$$H|\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$$

$$\psi(t) = \exp(-i\lambda t/\hbar) |\psi^{[\lambda]}\rangle$$

Алгебраическая задача, сводится к задаче на собственные значения Гамильтониана H (конечномерный случай)

$$\frac{\sum_{j,k=0}^{n-1} \alpha_j^* H_{jk} \alpha_k}{\sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k^* \alpha_k} \xrightarrow{\alpha} \text{extremum}$$

Квантовые Вычисления как Квантовая Динамика

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (1)$$

Эволюция системы как квантовый канал (унитарный случай)

$$A^{OUT} = \mathcal{U} A^{IN} \mathcal{U}^\dagger \quad (2)$$

Для уравнения Шрёдингера унитарный оператор \mathcal{U}

$$\mathcal{U} = \exp \left[-i \frac{\tau}{\hbar} H \right] \quad (3)$$

$$|\psi^{(t)}\rangle = |\mathcal{U}_{N_t} \mathcal{U}_{N_t-1} \dots \mathcal{U}_1 |\psi^{(0)}\rangle \quad (4)$$

Определяет квантовый канал. Число преобразований $N_t = t/\tau$. Вместо многих фиксированных \mathcal{U}_k можно рассматривать один $\mathcal{U}(t)$.

Квантовые вычисления это результат квантовой эволюции системы.

Квантовый алгоритм — это инструкция какой надо создать \mathcal{U}_k и $|\psi_0\rangle$.

Замечу что H по \mathcal{U} определяется неоднозначно. $H = i\frac{\hbar}{\tau} \ln \mathcal{U}$. Есть много разных H приводящих к одному и тому же \mathcal{U} . Для вычислений нужен именно определённый \mathcal{U} , а не H .

Квантовые Каналы

Унитарный. Преобразует чистое состояние в чистое

$$A^{OUT} = \mathcal{U} A^{IN} \mathcal{U}^\dagger$$

Канал с Kraus rank $N_s > 1$. Преобразует чистое состояние в смешанное.

$$A^{OUT} = \sum_{s=0}^{N_s-1} B_s A^{IN} B_s^\dagger$$

Можно добавлять слагаемые в уравнение Шрёдингера и получить уравнение Линдблада, дающее такую эволюцию.

Посмотрим на эти каналы как на матричные вычисления на классическом компьютере

Данные на Вход, Данные на Выход

Для классических данных, отображение вектор в вектор

$$\mathbf{x}^{(l)} \rightarrow \mathbf{f}^{(l)} \quad l = 1 \dots M \quad (5)$$

надо построить отображение типа матрица плотности в матрицу плотности

$$\rho^{(l)} \rightarrow \varrho^{(l)} \quad (6)$$

или волновая функция в волновую функцию

$$\psi^{(l)} \rightarrow \phi^{(l)} \quad (7)$$

которые потом можно передавать через квантовый канал и получать результат вычислений.

Вычислительная модель: $\rho^{(l)}$ – вопрос, $\rightarrow \varrho^{(l)}$ – ответ.

Данные на Вход, Данные на Выход. Примеры

$$\mathbf{x}^{(l)} \rightarrow \mathbf{f}^{(l)} \quad l = 1 \dots M$$

Преобразуем в

$$\frac{\sum_{j,k=0}^{n-1} x_j G_{jk}^{\mathbf{x};-1} x_k^{(l)}}{\sqrt{\sum_{j,k=0}^{n-1} x_j^{(l)} G_{jk}^{\mathbf{x};-1} x_k^{(l)}}} \rightarrow \frac{\sum_{j,k=0}^{D-1} f_j G_{jk}^{\mathbf{f};-1} f_k^{(l)}}{\sqrt{\sum_{j,k=0}^{D-1} f_j^{(l)} G_{jk}^{\mathbf{f};-1} f_k^{(l)}}} \quad (8)$$

Здесь $x_k^{(l)}$ and $f_j^{(l)}$ — компоненты входных векторов, а x_k и f_j — компоненты аргументов волновых функций $\rho^{(l)} \rightarrow \varrho^{(l)}$.

Матрицы $G_{jk}^{\mathbf{x}} = \langle x_j | x_k \rangle$ and $G_{jk}^{\mathbf{f}} = \langle f_j | f_k \rangle$ представляют собой матрицы Грама, вычисленные из $\mathbf{x}^{(l)}$ и $\mathbf{f}^{(l)}$ путем усреднения по исходной выборке.

Есть и другие варианты, обсуждали на прошлом докладе.

Задачи ML/AI

По заданной обучающей выборке данных $\mathbf{x}^{(l)} \rightarrow \mathbf{f}^{(l)}$ строим квантовый канал, после чего используем его для предсказаний. Представление знания в виде **квантового канала**.
Есть и другие виды представления знания:

- коэффициенты линейной регрессии
- веса персептрона
- логические формулы
- методы опорных векторов
- правила и деревья решений
- нечеткая логика
- веса нейронной сети и deep learning

Критерий Качества

Fidelity – функция близости состояний в квантовой механике. Для чистых состояний

$$F(|\phi\rangle\langle\phi|, |\psi\rangle\langle\psi|) = |\langle\phi|\psi\rangle|^2$$

Для чистого и смешанного состояния

$$F(|\phi\rangle\langle\phi|, \varrho) = \langle\phi|\varrho|\phi\rangle$$

Для двух смешанных состояний

$$F(\varrho, \sigma) = \text{Tr} \sqrt{\varrho^{1/2} \sigma \varrho^{1/2}}$$

Вопрос на самом деле сложный. Ниже мы будем рассматривать только $\langle\phi|\varrho|\phi\rangle$, т.к. нам нужна квадратичная функция по операторам квантового канала.

$$\mathcal{F} = \sum_{l=1}^M \omega^{(l)} \sum_{s=0}^{N_s-1} \left\langle \phi^{(l)} \left| B_s \right| \rho^{(l)} \left| B_s^\dagger \right| \phi^{(l)} \right\rangle$$

Квадратичная Total Fidelity и Квадратичные Constraints

$$\mathcal{F} = \sum_{l=1}^M \omega^{(l)} \sum_{s=0}^{N_s-1} \left\langle \phi^{(l)} \left| B_s \right| \rho^{(l)} \left| B_s^\dagger \right| \phi^{(l)} \right\rangle$$

Раскрыв скобки, получаем квадратичную форму

$$\mathcal{F} = \sum_{s=0}^{N_s-1} \sum_{j,j'=0}^{D-1} \sum_{k,k'=0}^{n-1} B_{s,jk}^* S_{jk;j'k'} B_{s,j'k'}$$

Её нужно максимизировать subject to constraints (сохранение следа матрицы)

$$\delta_{kk'} = \sum_{s=0}^{N_s-1} \sum_{j=0}^{D-1} B_{s,jk}^* B_{s,jk'}$$

QСQР задача

QСQР – максимизация (экстремальность) квадратичной формы при квадратичных условиях вида $<$, $>$, $=$, а также возможно ещё и некоторого количества линейных условий.

Пример 1: задача на собственные значения – квадратичный constraint **один** — нормировка на единицу волновой функции.

Пример 2: Unitary Learning. Восстановить унитарный оператор. Очень сложная задача.

Решали на прошлом докладе. Результаты: Есть оригинальный алгоритм решения глобальной оптимизации. Требуется итерационное решение задачи на собственные значения размером

- $O(n^2)$ для Unitary Learning
- $O(n^4)$ для квантового канала полного ранга.

Квантовый Канал в Choi Представлении

$$\mathcal{J}_{jk;j'k'} = \sum_{s=0}^{N_s-1} B_{s,jk}^* B_{s,j'k'}$$

Тогда и целевая функция и constraints становятся линейными функциями \mathcal{J}

$$\mathcal{F} = \sum_{j,j'=0}^{D-1} \sum_{k,k'=0}^{n-1} \mathcal{J}_{jk;j'k'} S_{jk;j'k'}$$
$$\delta_{kk'} = \sum_{j=0}^{D-1} \mathcal{J}_{jk;jk'}$$

Матрица $\mathcal{J}_{jk;j'k'}$ должна иметь только положительные собственные значения, здесь пара (j, k) рассматривается как мультииндекс $\mathbf{i} = (j, k)$

$$\mathcal{J} \succeq 0$$

Semidefinite Programming

Максимизировать fidelity \mathcal{F}

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr} \mathcal{J} S &\rightarrow \max \\ \mathrm{Tr} \mathcal{J} A_c &= \beta_c & c = 1 \dots N_c \\ \mathcal{J} &\succeq 0\end{aligned}$$

Это в точности даёт задачу восстановления квантового канала **полного ранга**

$$N_s = \dim(IN) \dim(OUT)$$

Задача выпуклая. Решается любым методом (например внутренней точки). Любой локальный максимум является глобальным. Если добавить условие на ранг \mathcal{J} (например для унитарного преобразования $N_s = 1$)

$$\mathrm{rank} \mathcal{J} = N_s$$

получаем невыпуклую задачу, которую очень сложно решать.

Квантовый канал как классическая вычислительная модель

Два компонента обработки матриц:

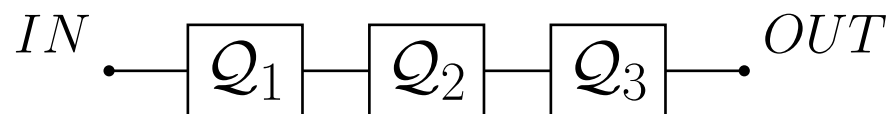
$$\rho \rightarrow [Q] \rightarrow \varrho$$

$$\text{Квантовый канал: } \varrho = \sum_{s=0}^{N_s-1} B_s \rho B_s^\dagger$$

$$\begin{matrix} \rho^{(1)} \\ \vdots \\ \rho^{(m)} \end{matrix} \rightarrow [T] \rightarrow \varrho$$

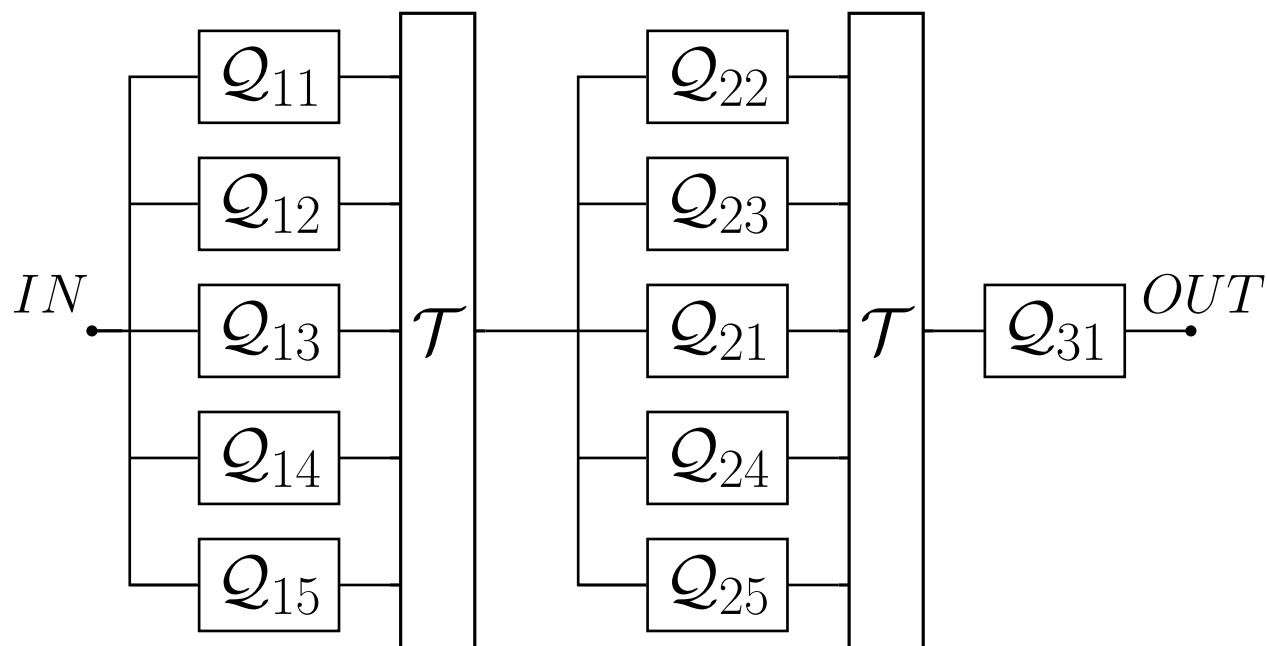
$$\text{Тензорное произведение: } \varrho_{\mathbf{j}\mathbf{j}'} = \rho_{j_1 j'_1}^{(1)} \cdots \rho_{j_m j'_m}^{(m)}$$

Можно делать последовательную обработку



Density Matrix Network

или объединять в сети. Последовательная обработка матрицы плотности



За преобразованием ясный физический смысл — квантовый канал. Выбор конкретной топологии является лишь вопросом вычислительной оптимизации. Это контрастирует с нейронными сетями, где выбор подходящей топологии является решающим фактором успеха. Ещё одной причиной выбора квантового канала является то, что практический анализ данных обычно включает как когерентные, так и некогерентные эффекты.

Выводы

- Обратная задача восстановления квантового канала полного ранга $N_s = \dim(\rho)\dim(\varrho)$ является выпуклой и легко решается.
- Случай фиксированного ранга $N_s < \dim(\rho)\dim(\varrho)$, например для unitary learning $N_s = 1$ очень сложен, задача невыпуклая, её решали на прошлом семинаре памяти И.П.Ипатовой 19 декабря 2024.
- Квантовый канал рассматриваемый как отображение абстрактных матриц

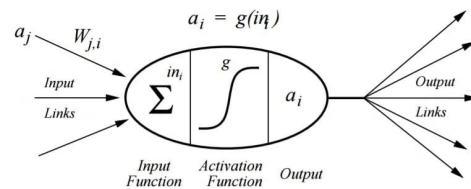
$$A^{OUT} = \sum_{s=0}^{N_s-1} B_s A^{IN} B_s^\dagger$$

Является перспективной альтернативой например весам нейронных сетей. В частности понятна калибровка.

Спасибо за внимание

задача восстановления квантового канала полного ранга выпукла

Используем $A^{OUT} = \sum_{s=0}^{N_s-1} B_s A^{IN} B_s^\dagger$ вместо



$$a_i = g\left(\sum_j W_{j,i} a_j\right)$$