

Решение обратной задачи квантовой механики методом шрёдингеровподобного уравнения

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)

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

Алгебраическая задача которую легко решить.

$$\frac{\sum_{j,k=0}^{n-1} \alpha_j^* H_{jk} \alpha_k}{\sum_{j,k=0}^{n-1} \alpha_j^* Q_{jk} \alpha_k} \xrightarrow[\alpha]{} \max$$
$$|H|\alpha\rangle = \lambda |Q|\alpha\rangle$$

возможны однородные линейные constraints

$$0 = \sum_{k=0}^{n-1} C_{ik} \alpha_k$$

Запись в неортогональном базисе и с однородными линейными constraints.
Всегда можно преобразовать в стандартное уравнение

$$H\psi = \lambda\psi$$

H – Эрмитова матрица. ψ – вектор. λ – вещественный скаляр.

QCQP задача

Прямая задача квантовой механики сводится к Quadratically Constraint Quadratic Program

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

subject to

$$1 = \sum_{j,k=0}^{n-1} \alpha_j^* Q_{jk} \alpha_k$$

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

В задаче на собственные значения constraint **один** — нормировка на единицу волновой функции. Мы можем использовать с.в. соответствующий максимальному с.з. для решения QCQP задачи с одним единственным constraint.

Обратная Задача Квантовой Механики

Квантовая система с независимым от времени Гамильтонианом H . Временная эволюция

$$\mathcal{U} = \exp \left[-i \frac{t}{\hbar} H \right]$$
$$\left| \psi^{(t)} \right\rangle = \left| \mathcal{U} \right| \psi^{(t=0)} \rangle$$

Пусть есть длинная последовательность $l = 1 \dots M$ наблюдений в моменты времени $t_l = \tau l$

$$\psi^{(l)} \rightarrow \psi^{(l+1)} \qquad \text{weight } \omega^{(l)} = 1$$

Унитарный оператор $\mathcal{U}$ с $t = \tau$ определяет временную эволюцию

$$\left| \psi^{(l+1)} \right\rangle = \left| \mathcal{U} \right| \psi^{(l)} \rangle$$

Обратная Задача

Для большого числа наблюдений $l = 1 \dots M$

$$\mathbf{x}^{(l)} = \psi^{(l)}$$

$$\mathbf{f}^{(l)} = \psi^{(l+1)}$$

таких что $\mathbf{x}^{(l)}$ и $\mathbf{f}^{(l)}$ связаны унитарным преобразованием

$$\mathbf{f}^{(l)} = \mathcal{U} \mathbf{x}^{(l)}$$

Восстановить унитарный оператор $\mathcal{U}$.

Обратная Задача. Восстановление Гамильтониана

Далее получаем Гамильтониан как

$$H = i\frac{\hbar}{\tau} \ln \mathcal{U}$$

Проблема взятия логарифма от унитарной матрицы решается отдельно и сейчас не рассматривается (есть неоднозначность, различные H соответствуют одному $\mathcal{U}$). Рассматриваем только задачу восстановить $\mathcal{U}$ из наблюдаённых данных. Задача была бы тривиальной (сводящейся к линейной регрессии) если бы мы знали точные значения $\mathbf{x}^{(l)}$ и $\mathbf{f}^{(l)}$

$$\psi^{(l+1)} = \mathcal{U}\psi^{(l)}$$

Но в результате измерений знаем $\mathbf{x}^{(l)}$ и $\mathbf{f}^{(l)}$ только с точностью до случайных фаз ξ_l и ζ_l .

$$\mathbf{x}^{(l)} = \exp(i\xi_l)\psi^{(l)}$$

$$\mathbf{f}^{(l)} = \exp(i\zeta_l)\psi^{(l+1)}$$

Средние от f, x по выборке зависят от случайных фаз ξ_l и ζ_l и использоваться не могут!

$$\langle f_j | x_k \rangle_M = \sum_{l=1}^M \omega^{(l)} f_j^{(l)*} x_k^{(l)} \exp(i(\xi_l - \zeta_l))$$

Fidelity

Для чистых состояний $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ их “похожесть” определяется Fidelity

$$F = |\langle\psi|\phi\rangle|^2$$

Случайные фазы в $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ не влияют на fidelity.

Качество пробного оператора $\mathcal{U}$ можно оценить через общую fidelity выборки

$$\mathcal{F} = \sum_{l=1}^M \left| \langle \mathbf{f}^{(l)} | \mathcal{U} | \mathbf{x}^{(l)} \rangle \right|^2 \omega^{(l)} = \sum_{l=1}^M \left| \langle \psi^{(l+1)} | \mathcal{U} | \psi^{(l)} \rangle \right|^2 \omega^{(l)} \xrightarrow{\mathcal{U}} \max$$

subject to: $\mathcal{U}$ является унитарным оператором.

$$\mathcal{U}\mathcal{U}^\dagger = \mathbb{1}$$

Обратная Задача как QСQR

Среди всех унитарных операторов $\mathcal{U}$ найти максимизирующий общую fidelity $\mathcal{F}$ выборки

$$\mathcal{F} = \sum_{l=1}^M \left| \left\langle \mathbf{f}^{(l)} \middle| \mathcal{U} \middle| \mathbf{x}^{(l)} \right\rangle \right|^2 \omega^{(l)} \xrightarrow{\mathcal{U}} \max$$

subject to:

$$\mathcal{U}\mathcal{U}^\dagger = \mathbb{1}$$

Важно: Задача является QСQR

и не зависит от случайных фаз в $\mathbf{f}^{(l)}$ и $\mathbf{x}^{(l)}$

$\mathcal{F}$ квадратична по $\mathcal{U}$, если $|\mathbf{f}^{(l)}\rangle$ и $|\mathcal{U}\mathbf{x}^{(l)}\rangle$ совпали для всех l , то $\mathcal{F} = M$.

Условие унитарности квадратично по $\mathcal{U}$, всего условий $n(n+1)/2$.

QСQR в явном виде

$$\mathcal{F} = \sum_{l=1}^M \left| \left\langle \mathbf{f}^{(l)} \left| \mathcal{U} \right| \mathbf{x}^{(l)} \right\rangle \right|^2 \omega^{(l)}$$

раскроем скобки

$$S_{jk;j'k'} = \sum_{l=1}^M \omega^{(l)} f_j^{(l)*} x_k^{(l)*} f_{j'}^{(l)} x_{k'}^{(l)}$$
$$\mathcal{F} = \sum_{j,j'=0}^{n-1} \sum_{k,k'=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* S_{jk;j'k'} \mathcal{U}_{j'k'}$$

Эрмитов тензор $S_{jk;j'k'} = S_{j'k';jk}^*$ как матрица квадратичной формы элементов унитарного оператора $\mathcal{U}_{jk}$. $S_{jk;j'k'}$ вычисляется непосредственно из выборки наблюдаемых $\mathbf{f}^{(l)}$ и $\mathbf{x}^{(l)}$.

$$\delta_{jj'} = \sum_{k=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* \mathcal{U}_{j'k} \quad j, j' = 0 \dots n-1$$

QCQP

$$\mathcal{F} = \sum_{j,j'=0}^{n-1} \sum_{k,k'=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* S_{jk;j'k'} \mathcal{U}_{j'k'} \xrightarrow{\mathcal{U}} \max$$

$$\delta_{jj'} = \sum_{k=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* \mathcal{U}_{j'k} \quad j, j' = 0 \dots n-1$$

Квадратичное $\mathcal{F}$ и квадратичные constraints. Квадратичный по $\mathcal{U}$ Лагранжиан. Здесь $\lambda_{jj'}$ – неопределённые множители Лагранжа. Их столько же, сколько constraints.

$$\mathcal{L} = \sum_{j,j'=0}^{n-1} \sum_{k,k'=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* S_{jk;j'k'} \mathcal{U}_{j'k'} + \sum_{j,j'=0}^{n-1} \lambda_{jj'} \left[\delta_{jj'} - \sum_{k=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* \mathcal{U}_{j'k} \right] \xrightarrow{\mathcal{U}} \max$$

варьирование $\mathcal{L}$ по $\mathcal{U}$ даёт линейное по $\mathcal{U}$ уравнение

Новая Алгебраическая Задача. Шрёдингероподобное ур.

Варьирование Лагранжиана даёт новую алгебраическую задачу

$$S\mathcal{U} = \lambda\mathcal{U}$$

- S — Эрмитов тензор $S_{jk;j'k'} = S_{j'k';jk}^*$
- $\mathcal{U}$ — Унитарный оператор
- λ — Эрмитова матрица, $\mathcal{F}^{\max} = \text{Tr}\lambda$.

Сравнить с уравнением Шрёдингера на собственные значения

$$H\psi = \lambda\psi$$

H — Эрмитова матрица. ψ — вектор единичной длины. λ — вещественный скаляр.

Максимизация $\mathcal{F}$

Где возникает максимизация/минимизация $\mathcal{F} = \sum_{j,j'=0}^{n-1} \sum_{k,k'=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* S_{jk;j'k'} \mathcal{U}_{j'k'}$:

- Обратные задачи механики, электродинамики, квантовой механики.
- Задачи Machine Learning, представление знания в виде унитарного оператора.
- Предсказание будущего как унитарная динамика.
- Искусственный интеллект.
- Quantum Computing.

Самое важное в ИИ — представление знания. Примеры: коэффициенты линейной регрессии, набор правил, логические формулы, веса нейронных сетей, и **унитарные операторы!**

Как решали ранее $\mathcal{F} \rightarrow \max$

Параметризовать $\mathcal{U}$ параметрами θ . Примеры:

- Группа $\text{SO}(3)$: в $n = 3$ это 3 угла Эйлера, в общем случае $n(n - 1)/2$ углов.
- Экспонента от Эрмитовой матрицы $\mathcal{U} = \exp(-i H)$; здесь θ — верхняя часть H .
- Преобразование Cayley, $\mathcal{U} = (I - A)(I + A)^{-1}$ для $A^\dagger = -A$; θ — верхняя часть A .
- ... много других унитарных параметризаций $\mathcal{U}(\theta)$.

Варьировать $\mathcal{F}$ по параметрам θ определяющим $\mathcal{U}(\theta)$, решение задачи оптимизации.

Основные концепции: производная, градиент, вторая производная. Используются методы **математического анализа**.

Проблемы: Один кандидат на лучшее решение, трудно найти глобальный максимум.

Как мы решаем $\mathcal{F} \rightarrow \max$

- Сформулировать задачу как QCQP.
- Вычислить тензор $S_{jk;j'k'}$ из наблюдаемых данных.
- Записать алгебраическую задачу $S\mathcal{U} = \lambda\mathcal{U}$
- Решить численно, разработан численный метод.

Основные концепции: **алгебра**, алгебраическая задача, итерационный метод, задача на собственные значения как элемент численного метода. Имеем не одного кандидата в решение, а много (число собственных значений до n^2). Можем найти глобальный максимум.

Проблемы: вычислительная сложность, размерность итерационной задачи на собственные значения составляет $n(n-1)/2 + 1$.

Численный метод

$$\mathcal{F} = \sum_{j,j'=0}^{n-1} \sum_{k,k'=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* S_{jk;j'k'} \mathcal{U}_{j'k'} \xrightarrow{\mathcal{U}} \max$$
$$\delta_{jj'} = \sum_{k=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* \mathcal{U}_{j'k}$$

Вместо всех $n(n+1)/2$ унитарных constraints рассмотрим их подмножество, один единственный — сумму диагональных элементов

$$n = \sum_{j,k=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* \mathcal{U}_{jk} = \sum_{j,k=0}^{n-1} |\mathcal{U}_{jk}|^2$$

С таким единственным constraint это обычная задача на собственные значения размерности n^2 . При этом полученное $\mathcal{U}_{jk}$ не удовлетворяет всем условиям унитарности.

Численный метод. Итерационный шаг

Имея $\tilde{\mathcal{U}}$ легко (решением линейной системы) получить значения неопределённых множителей Лагранжа λ_{jk} как Эрмитову матрицу и построить $\mathcal{S}_{jk;j'k'}$

$$\mathcal{S}_{jk;j'k'} = S_{jk;j'k'} - \lambda_{jj'}\delta_{kk'}$$

С которой опять решить обычную задачу на собственные значения размерности n^2 .

$$\frac{\sum_{j,j'=0}^{n-1} \sum_{k,k'=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* \mathcal{S}_{jk;j'k'} \mathcal{U}_{j'k'}}{\sum_{j=0}^{n-1} \sum_{k=0}^{n-1} |\mathcal{U}_{jk}|^2} \xrightarrow{\mathcal{U}} \max$$

(как итерационный шаг), далее выбрать один из n^2 с.в. как кандидата в решение. Повторить итерацию. Но сходиться такие итерации не будут.

Численный метод. Convergence helper constraints.

Основная Концепция

Концептуально – заменить $n(n+1)/2$ шт. квадратичных условий унитарности

$$\delta_{jj'} = \sum_{k=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* \mathcal{U}_{j'k}$$

на одно квадратичное условие (сумма диагональных элементов)

$$n = \sum_{j,k=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* \mathcal{U}_{jk} = \sum_{j,k=0}^{n-1} |\mathcal{U}_{jk}|^2$$

и $n(n+1)/2 - 1$ линейных условий, которые просто уменьшают размерность пространства.

После этого итерационный алгоритм с задачей на собственные значения размерности $n^2 - n(n+1)/2 + 1 = n(n-1)/2 + 1$ как его основа — очень хорошо сходится

Численный метод

Конкретная реализация численного метода непринципиальна. Важно что для любого $S_{jk;j'k'}$ мы можем решить алгебраическую задачу

$$S\mathcal{U} = \lambda\mathcal{U}$$

численное решение QCQP задачи

$$\mathcal{F} = \sum_{j,j'=0}^{n-1} \sum_{k,k'=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* S_{jk;j'k'} \mathcal{U}_{j'k'} \xrightarrow{\mathcal{U}} \max$$
$$\delta_{jj'} = \sum_{k=0}^{n-1} \mathcal{U}_{jk}^* \mathcal{U}_{j'k}$$

А неопределённые множители Лагранжа, это “собственные матрицы” λ_{ij} ; $\mathcal{F}^{\max} = \text{Tr} \lambda$.

$$\lambda_{ij} = \text{Herm} \sum_{j'=0}^{n-1} \sum_{k,k'=0}^{n-1} \mathcal{U}_{ik}^* S_{jk;j'k'} \mathcal{U}_{j'k'}$$

Численный метод как библиотечная процедура

О численном решении алгебраической задачи

$$S\mathcal{U} = \lambda\mathcal{U}$$

можно думать как о вызове библиотечной процедуры: На вход $S_{jk;j'k'}$, на выход $\mathcal{U}_{jk}$ и λ_{ij} соответствующие максимально возможному $\mathcal{F} = \text{Tr}\lambda$.

Аналогично стандартным библиотечным процедурам решения задачи на собственные значения. В библиотеке LAPACK есть свыше 15 различных алгоритмов решения задачи

$$H\psi = \lambda\psi$$

На вход Гамильтониан H_{jk} , на выход вектор ψ_k и скаляр λ соответствующие основному состоянию, минимально (максимально) возможному λ .

Пример. Восстановление Унитарной Матрицы

Случайным образом сгенерировали ортогональную (вещественную унитарную) матрицу размерности n . Сгенерировали $M = 1000$ наблюдений начиная с некоторого $\mathbf{X}^{(0)}$.

$$\mathbf{X}^{(l+1)} = \mathcal{U}\mathbf{X}^{(l)}$$

Построили наблюдаемые, здесь ξ_l и ζ_l случайные величины принимающие значения ± 1 .

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(l)} &= \xi_l \mathbf{X}^{(l)} \\ \mathbf{f}^{(l)} &= \zeta_l \mathbf{X}^{(l+1)}\end{aligned}$$

Продемонстрировано идеальное восстановление матрицы $\mathcal{U}$ для размерностей n от 2 до 50.

Ограничения на n следуют не из численной неустойчивости, а из вычислительной сложности. В градиентных методах (методы мат. анализа) проблемы нахождения глобального максимума начинаются с $n \gtrsim 5$.

Пример. Отображение Полиномов

Для $M = 1000$ точек $z^{(l)}$ из интервала $[-1 : 1]$ построили

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(l)} &= \xi_l \left(T_0, T_1(z^{(l)}), T_2(z^{(l)}), T_3(z^{(l)}), T_4(z^{(l)}), T_5(z^{(l)}) \right) \\ \mathbf{f}^{(l)} &= \zeta_l \left(P_0, P_1(z^{(l)}), P_2(z^{(l)}), P_3(z^{(l)}), P_4(z^{(l)}), P_5(z^{(l)}) \right)\end{aligned}$$

где T_k — полиномы Чебышева, а P_k — полиномы Лежандра. Задача — выразить одни через другие. Здесь ξ_l и ζ_l случайные величины принимающие значения ± 1

Задача может быть сведена к поиску унитарной матрицы и конечный ответ получен абсолютно точно (с точностью до знака), пример: $P_3 = 0.375T_1 + 0.625T_3$.

$$\begin{pmatrix} -1.0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1.0 & 0 & 0 & 0 \\ -0.25 & 0 & -0.75 & 0 & 0 \\ 0 & -0.375 & 0 & -0.625 & 0 \\ -0.140625 & 0 & -0.3125 & 0 & -0.546875 \end{pmatrix}$$

Спасибо за внимание

$$S\mathcal{U} = \lambda\mathcal{U}$$

импортозамещённое “уравнение Шрёдингера” для обратной задачи квантовой механики

- [1] Belov, M. G. and Malyshev, V. G., “Partially unitary learning”, Phys. Rev. E 110, 055306, (2024), 10.1103/PhysRevE.110.055306
- [2] Belov, M. G., Dubov, V. V., Filimonov, A. V., and Malyshev, V. G., “Quantum Channel Learning”. Phys. Rev. E 111, 015302, (2025), 10.1103/PhysRevE.111.015302