

Восстановление временно-зависимого квантового гамильтониана с использованием нейродифференциальных уравнений

А.С. Наумов,^{1,*} В.Ю. Попов^{1,†}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра математики
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 01.11.2025; после доработки 10.12.2025; подписана в печать 12.12.2025)

Рассматривается задача восстановления неизвестного временно-зависимого гамильтониана двухуровневой квантовой системы по данным о динамике системы. Предложен метод на основе нейронной сети в схеме Neural ODE, в котором непрерывная эволюция состояния моделируется интегрированием уравнения Шрёдингера с параметрической моделью гамильтониана, реализованной сетью. В качестве входных данных используются измеренные временные ряды средних значений операторов Паули для кубита. Обучение сети проводится путём минимизации разности между экспериментально наблюдаемыми и смоделированными траекториями квантовых наблюдаемых. На примере моделирования динамики спина в переменном магнитном поле показано, что предложенный подход позволяет с высокой точностью восстанавливать параметры временного гамильтониана, не требуя прерывания квантовой эволюции. Результаты демонстрируют, что Neural ODE-модель обеспечивает непрерывный учёт временного параметра и надёжную реконструкцию динамики системы в условиях ограниченных данных и шума.

PACS: 03.65.Aa, 03.65.Ta, 03.65.Wj, 07.05.Mh, 02.30.Nq. УДК: 519.6

Ключевые слова: нейронные сети, дифференциальные уравнения, квантовая механика.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.81.2610103](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.81.2610103)

ВВЕДЕНИЕ

Постановка задачи восстановления временно-зависимого квантового гамильтониана является ключевой для контроля и верификации квантовых устройств. В уравнении Шрёдингера зависимый от времени гамильтониан полностью определяет динамику квантовой системы. Знание структуры гамильтониана необходимо для настройки квантовых вентилях и симуляторов, а также для исследования неидеальностей квантовых эволюций. Классические методы квантовой томографии (например, метод Чуанга–Нильсена) восстанавливают динамику «чёрного ящика» только при предполагаемом стационарном гамильтониане, используя прерывающие измерения. Эти подходы не дают прямой информации о временной зависимости гамильтониана и обычно требуют проективных измерений до и после эволюции [2], что приводит к утрате информации о непрерывном процессе.

Существуют и другие схемы идентификации гамильтониана: например, алгоритмы на основе реализации собственных систем (ERA), методы сжатого восприятия и связанные машинные методы [3]. Однако при применении к временно-зависимым гамильтонианам такие методы чаще ограничены простейшими случаями (одиночный спин или специальный вид поля) [3]; их прямая оптимизация стал-

кивается с задачей бесконечномерного пространства параметров времени [3], [12]. Кроме того, широко используемые подходы, основанные на реконструкции матрицы плотности и процессе квантовой эволюции, предполагают статичную динамику и прерывистое измерение системы [2], что не подходит для изучения непрерывно изменяющихся взаимодействий. Например, Siva et al. (2023) показали, что реконструкция полного временно-зависимого гамильтониана требует прерывания или слабого измерения во времени.

Для преодоления перечисленных ограничений целесообразно использовать методы машинного обучения, предназначенные для непрерывной эволюции [9]. В частности, подход Neural ODE (введённый Chen et al., 2018) позволяет параметризовать производную состояния нейросетью и интегрировать непрерывно во времени, избегая жёсткой дискретизации [10]. Такая схема естественным образом согласуется с формализмом квантовой динамики: эволюция квантового состояния кубита подчиняется уравнению Шрёдингера, что аналогично интегрированию дифференциального уравнения состояния в Neural ODE. Более того, как отмечают Cao et al. (2025), обобщение Neural ODE для квантовых систем (QNODE) позволяет эффективно вычислять градиенты по параметрам гамильтониана через метод сопряжённых переменных [2, 11].

В работе мы рассматриваем два типа мысленных/экспериментальных сценариев, при которых в качестве входных данных могут выступать временные ряды средних значений операторов Паули $\langle \sigma_i \rangle(t)$.

* E-mail: naumov.as22@physics.msu.ru

† E-mail: masterlu@mail.ru

Ансамблевые проективные измерения (повторные запуски). Система многократно подготавливается в одном и том же начальном состоянии, затем в серии независимых экспериментальных реализаций в момент времени t выполняется проективное измерение соответствующего оператора. Усреднение результатов по большому числу реализаций даёт аппроксимацию $\langle \sigma_i \rangle(t)$. При этой постановке требуются независимые прерывающиеся измерения, но каждое измерение выполняется на новой копии системы, т.е. непрерывная эволюция отдельной копии при этом не прерывается.

Непрерывная слабая измерительная схема. Альтернативно, $\langle \sigma_i \rangle(t)$ может поступать как выход модели слабых непрерывных измерений (например, при непрерывном мониторинге), причём в этом случае эволюция одной и той же квантовой системы фактически становится неунитарной и требует описания открытой системы. В настоящей работе мы сосредоточены на замкнутой модели в качестве доказательства работоспособности метода.

Коэффициент при единичной матрице I ($a_0(t)$ в разложении гамильтониана) не влияет на динамику наблюдаемых (даёт только глобальную фазу) и потому принципиально неидентифицируем из измерений $\langle \sigma_i \rangle(t)$. В основной реализации мы полагаем $a_0(t) = 0$ и восстанавливаем только физически измеримые члены при Паули-матрицах.

1. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Для полного понимания работы нейронных сетей необходимо рассмотреть их математическое описание. Основным строительным блоком нейронных сетей является искусственный нейрон. Каждый искусственный нейрон принимает на вход некоторое количество значений, которые представляют собой входные сигналы. Эти значения умножаются на соответствующие веса связей и суммируются. После получения суммы взвешенных входных сигналов активация нейрона происходит через функцию активации. Она определяет, будет ли нейрон активирован и какой будет его выходной сигнал. Выходной сигнал нейрона передается следующему нейрону или используется для выполнения конкретной задачи.

Связи между нейронами в нейронной сети также имеют веса $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$, которые определяют важность каждой связи при передаче информации. Обучение нейронной сети заключается в настройке этих весов $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$, чтобы минимизировать ошибку между предсказанным и ожидаемым результатом:

$$\|F(\vec{x}) - \tilde{F}(\vec{\omega}, \vec{x})\| \rightarrow 0.$$

Математически нейронные сети можно описать как систему уравнений, где каждый нейрон выполняет определенные операции с входными данными, весами связей и функцией активации. Обучение

нейронной сети обычно осуществляется через методы оптимизации, такие как градиентный спуск, где минимизируется функция потерь.

Таким образом, математическое описание нейронных сетей позволяет понять их работу на более глубоком уровне и использовать этот знак для создания эффективных моделей и алгоритмов искусственного интеллекта. Нейронные сети продолжают развиваться и улучшаться, открывая новые возможности для решения сложных задач и создания инновационных технологий.

Нейродифференциальные уравнения (NeuralODE) — это дифференциальные уравнения, в которых правая часть задается нейросетью:

$$\frac{dz}{dt} = f(z(t), t).$$

Пусть у нас есть наблюдения: $(z_0, t_0), (z_1, t_1), \dots, (z_N, t_N)$

Найдём аппроксимацию $\hat{f}(z(t), t, \theta)$ функции динамики $f(z(t), t)$. Рассмотрим простую задачу, когда у нас есть 2 наблюдения: в начале и в конце траектории [1]. Изменяя параметр θ , можно минимизировать функцию потерь:

$$L(z(t_1)) = L(z(t_0)) + \int_{t_0}^{t_1} f(z(t), t, \theta) dt.$$

Для минимизации L определим, как L зависит от состояния в каждый момент времени $z(t)$:

$$a(t) = -\frac{\partial L}{\partial z(t)},$$

где $a(t)$ — сопряженное состояние.

Теорема 1 (Уравнение для сопряжённого состояния). Пусть $z(t)$ — гладкое решение обыкновенного дифференциального уравнения

$$\frac{dz}{dt} = f(z(t), t, \theta),$$

и пусть L — скалярный функционал, зависящий от траектории $z(\cdot)$, причём сопряжённое состояние определяется как

$$a(t) = -\frac{\partial L}{\partial z(t)}.$$

Тогда при условии гладкости f и дифференцируемости потока T_ε выполнено

$$\frac{da(t)}{dt} = -a(t) \frac{\partial f(z(t), t, \theta)}{\partial z}.$$

Доказательство. Обозначим через T_ε отображение потока за малый шаг времени ε :

$$z(t + \varepsilon) = T_\varepsilon(z(t), t).$$

По определению сопряжённого состояния имеем для всех ε достаточно малого

$$\begin{aligned} a(t) &= -\frac{\partial L}{\partial z(t)} = -\frac{\partial L}{\partial z(t + \varepsilon)} \frac{\partial z(t + \varepsilon)}{\partial z(t)} = \\ &= a(t + \varepsilon) \frac{\partial T_\varepsilon(z(t), t)}{\partial z(t)}. \end{aligned}$$

Вычислим производную $a(t)$ по определению:

$$\frac{da(t)}{dt} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{a(t + \varepsilon) - a(t)}{\varepsilon}.$$

Подставляя предыдущую тождественность, получаем

$$\begin{aligned} \frac{a(t + \varepsilon) - a(t)}{\varepsilon} &= \frac{a(t + \varepsilon) - a(t + \varepsilon) \frac{\partial T_\varepsilon(z(t), t)}{\partial z(t)}}{\varepsilon} = \\ &= a(t + \varepsilon) \frac{I - \frac{\partial T_\varepsilon(z(t), t)}{\partial z(t)}}{\varepsilon}. \end{aligned}$$

Используем асимптотическое представление якобиана потока при малом ε . Так как

$$z(t + \varepsilon) = z(t) + \varepsilon f(z(t), t, \theta) + o(\varepsilon),$$

то

$$\frac{\partial T_\varepsilon(z(t), t)}{\partial z(t)} = I + \varepsilon \frac{\partial f(z(t), t, \theta)}{\partial z} + o(\varepsilon).$$

Отсюда

$$\frac{I - \frac{\partial T_\varepsilon(z(t), t)}{\partial z(t)}}{\varepsilon} = -\frac{\partial f(z(t), t, \theta)}{\partial z} + o(1).$$

Подставляя в предел и учитывая непрерывность $a(t)$, получаем

$$\begin{aligned} \frac{da(t)}{dt} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} a(t + \varepsilon) \left(-\frac{\partial f(z(t), t, \theta)}{\partial z} + o(1) \right) = \\ &= -a(t) \frac{\partial f(z(t), t, \theta)}{\partial z}, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать. \square

1.1. Метод обратного распространения через ODE-солвер

В дискретных нейронных сетях обратное распространение ошибки (backpropagation) основано на правиле цепочки. Для Neural ODE ситуация сложнее: модель описывает непрерывную динамику:

$$\dot{z}(t) = f(z(t), t, \theta), \quad z(t_0) = z_0. \quad (1)$$

Чтобы вычислить градиенты функции потерь $L(z(t_1))$, необходимо учитывать эволюцию состояния во времени.

Сначала решается прямая задача: интегрируем систему от t_0 до t_1 и получаем состояние $z(t_1)$.

Определяем функцию потерь $L = L(z(t_1))$.

Вводим сопряжённую переменную

$$a(t) = \frac{\partial L}{\partial z(t)},$$

которая удовлетворяет уравнению

$$\dot{a}(t) = -\left(\frac{\partial f}{\partial z}(z(t), t, \theta) \right)^T a(t), \quad a(t_1) = \frac{\partial L}{\partial z(t_1)}.$$

Это уравнение интегрируется назад во времени от t_1 к t_0 .

Градиенты по параметрам модели вычисляются через интеграл:

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} = - \int_{t_1}^{t_0} a^T(t) \frac{\partial f}{\partial \theta}(z(t), t, \theta) dt.$$

1.2. Решение уравнения для сопряжённого состояния

Решим дифференциальное уравнение $\frac{da(t)}{dt} = -a(t) \frac{\partial f(z(t), t, \theta)}{\partial z}$ назад во времени и получим зависимость от начального состояния $z(t_0)$:

$$\frac{\partial L}{\partial z(t_0)} = \int_{t_1}^{t_0} a(t) \frac{\partial f(z(t), t, \theta)}{\partial z} dt.$$

Для минимизации функции потерь нужно рассчитать её градиент по отношению к $z(t_0), \theta, t_0, t_1$. Для этого можно считать t и θ частью состояния. Такое состояние называется аугментированным:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} z \\ \theta \\ t \end{bmatrix} (t) = f_{aug}([z, \theta, t]) = \begin{bmatrix} f([z, \theta, t]) \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

где f_{aug} — аугментированная динамика.

Сопряжённое состояние к этому аугментированному состоянию:

$$a_{aug} = \begin{bmatrix} a \\ a_\theta \\ a_t \end{bmatrix},$$

$$a_\theta(t) = \frac{\partial L}{\partial \theta(t)},$$

$$a_t(t) = \frac{\partial L}{\partial t}.$$

Матрица градиента аугментированной динамики:

$$\frac{\partial f_{aug}}{\partial [z, \theta, t]} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial z} & \frac{\partial f}{\partial \theta} & \frac{\partial f}{\partial t} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Из уравнения (1) получаем выражение для сопряжённого аугментированного состояния:

$$\frac{da_{aug}}{dt} = - \begin{bmatrix} a \frac{\partial f}{\partial z} & a \frac{\partial f}{\partial \theta} & a \frac{\partial f}{\partial t} \end{bmatrix}.$$

Решим это дифференциальное уравнение и получим:

$$\frac{\partial L}{\partial z(t_0)} = \int_{t_1}^{t_0} a(t) \frac{\partial f(z(t), t, \theta)}{\partial z} dt,$$

$$\frac{\partial L}{\partial t_0} = \int_{t_1}^{t_0} a(t) \frac{\partial f(z(t), t, \theta)}{\partial t} dt,$$

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} = \int_{t_1}^{t_0} a(t) \frac{\partial f(z(t), t, \theta)}{\partial \theta} dt.$$

Эти уравнения вместе с уравнением (1) дают градиенты функции потерь по всем входным параметрам.

2. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ВРЕМЕННО-ЗАВИСИМОГО КВАНТОВОГО ГАМИЛЬТониАНА

Среди актуальных задач квантовой механики — реконструкция неизвестного временем изменяющегося гамильтониана квантовой системы по экспериментальным данным. Этот гамильтониан определяет динамику системы на основе уравнения Шредингера (или уравнения Гейзенберга) с явной временной зависимостью. Важность задачи обусловлена, например, необходимостью контроля квантовых процессоров: временно-зависимый гамильтониан задаёт протоколы квантовых ворот и квантовых симуляций. При этом существующие методы либо не предназначены для непрерывно меняющихся гамильтонианов, либо требуют прерывать эволюцию системы, что искажает результирующий гамильтониан [2, 3].

2.1. Современные подходы к задаче

Классические методы квантовой томографии, например метод Чуанга–Нильсена, восстанавливают динамику «черного ящика» при стационарном гамильтониане с помощью прерывающих измерений [2]. Эти методы не дают прямой информации о временной зависимости гамильтониана и зачастую требуют измерений до и после эволюции.

Siva et al. (2023) экспериментально продемонстрировали восстановление неизвестного временно-зависимого (точнее, меняющегося по известному протоколу) гамильтониана двух сверхпроводящих кубитов с помощью непрерывных слабых измерений без прерывания эволюции [2, 14]. Авторы предложили алгоритм, который восстанавливает $H(t)$ и матрицу плотности системы из неполного набора непрерывных измерений, показывая высокую точность для однокубитных и двухкубитных взаимодействий [2].

Han et al. (2021) предложили машинно-обученный метод для определения структуры неизвестного временно-зависимого гамильтониана квантовой цепочки спинов. Они ввели нейросеть, встраивающую уравнение Гейзенберга в функцию потерь (так называемый Heisenberg neural network), что позволяет из временного ряда локальных измерений «научиться» оператору $H(t)$ [3]. Их подход показал возможность восстанавливать не только локальные члены гамильтониана, но и полную структуру взаимодействий во всей системе, демонстрируя высокую точность даже при измерениях только одного спина [3].

Ряд работ фокусируется на задаче обучения статического гамильтониана по траекториям (Hamiltonian Learning), в том числе с использованием нейросетевых моделей [4, 14]. Однако они рассматривают либо закрытые стационарные системы, либо открытые системы с марковской динамикой, без явной временной зависимости параметров. Таким образом, общие методы Hamiltonian Learning пока не учитывают изменения H во времени.

2.2. Научная новизна данного подхода

Метод Neural ODE — нейросеть непрерывной глубины, обучающаяся по данным о производной во времени. В квантовой механике он естественно соответствует построению модели генератора эволюции (гамильтониана или супероператора) через непрерывный ODE. Хотя Neural ODE уже применялись к квантовым системам (например, к обучению динамики закрытых и открытых систем [5] и к обучению статических гамильтонианов [4]), их использование для восстановления временно-зависимого гамильтониана остаётся открытой задачей. В частности, в упомянутых работах решались задачи с неизменным во времени гамильтонианом или эволюцией по известному формату, но не учитывалось обобщённое нелинейное изменение $H(t)$. Новизна применения Neural ODE заключается в возможности учесть зависимость от времени как дополнительный вход нейросети (т.е. сделать модель неавтономной), обеспечив сквозное обучение непрерывного процесса. На данный момент нам не известны публикации, где Neural ODE целенаправленно использовались бы для восстановления неизвестной временной структуры квантового гамильтониана — что создаёт научную новизну предлагаемого подхода.

2.3. Преимущества Neural ODE для этой задачи

Neural ODE непосредственно моделируют непрерывную эволюцию квантового состояния или наблюдаемых, формально соответствуя уравнениям Шредингера/Гейзенберга [7]. Это позволяет не вводить искусственную дискретизацию времени (в отличие от многослойных сетей) и точно учитывать время как непрерывный параметр. Метод сопряжённых градиентов (adjoint method) обеспечивает эффективный вычислительный граф для оптимизации параметров модели [4].

Neural ODE часто обладают интерпретируемым латентным пространством. В частности, для QNODE показано, что близкие траектории в скрытом пространстве соответствуют похожим квантовым динамикам [5]. Это может позволить физически интерпретировать параметры латентных переменных как описывающие квантовое состояние. Таким образом, обучение Neural ODE может дать не

только численное решение, но и интуитивно понятный образ скрытой квантовой динамики.

2.4. Идентифицируемость и ограничение класса гамильтонианов

Формализуем ограничения на класс искомых гамильтонианов и дадим описание того, какие компоненты $H(t)$ могут быть восстановлены по наблюдаемым траекториям $\langle \sigma_i \rangle(t)$. Для конкретики рассмотрим двухуровневую систему с гамильтонианом вида

$$H(t) = a_x(t) \sigma_x + a_y(t) \sigma_y + a_z(t) \sigma_z + a_0(t) I, \quad (2)$$

где $\sigma_{x,y,z}$ — матрицы Паули, I — единичная матрица; далее положим $\hbar = 1$.

Пусть состояние системы описывается матрицей плотности

$$\rho(t) = \frac{1}{2} (I + \mathbf{r}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}),$$

где $\mathbf{r}(t) = (r_x, r_y, r_z)^\top$, $\langle \sigma_i \rangle(t) = \text{Tr}[\rho(t) \sigma_i] = r_i(t)$. Для унитарной (замкнутой) эволюции с гамильтонианом (2) без учёта $a_0(t)$ уравнение фон Неймана даёт известное уравнение для $\mathbf{r}(t)$:

$$\dot{\mathbf{r}}(t) = 2 \mathbf{a}(t) \times \mathbf{r}(t), \quad \mathbf{a}(t) \equiv (a_x(t), a_y(t), a_z(t))^\top. \quad (3)$$

Отметим, что скалярный член $a_0(t)$ не влияет на коммутатор $[H, \rho]$ и, следовательно, на динамику $\mathbf{r}(t)$; поэтому $a_0(t)$ принципиально неидентифицируем из наблюдений $\langle \sigma_i \rangle(t)$ и в дальнейшем исключается из рассмотрения (либо фиксируется априорно) [6, 7].

Из уравнения (3) можно выразить только компоненту $\mathbf{a}(t)$, отвечающую за вращение в направлении, перпендикулярном $\mathbf{r}(t)$. Действительно, выполняя векторное умножение справа на \mathbf{r} и используя тождество векторного тройного произведения, получаем

$$\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}} = 2 \mathbf{r} \times (\mathbf{a} \times \mathbf{r}) = 2(\|\mathbf{r}\|^2 \mathbf{a} - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{a}) \mathbf{r}). \quad (4)$$

Отсюда следует представление для $\mathbf{a}(t)$:

$$\mathbf{a}(t) = \frac{\mathbf{r}(t) \times \dot{\mathbf{r}}(t)}{2\|\mathbf{r}(t)\|^2} + \alpha(t) \mathbf{r}(t), \quad (5)$$

где скалярная функция $\alpha(t) = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{a})/\|\mathbf{r}\|^2$ остаётся неопределённой [6]. Формула (5) показывает ключевой факт: из наблюдений $\mathbf{r}(t)$ и их производных можно однозначно восстановить только компоненту $\mathbf{a}_\perp(t)$, перпендикулярную $\mathbf{r}(t)$; компоненту, параллельную $\mathbf{r}(t)$, — нет [2, 3].

Следовательно, добавление к $\mathbf{a}(t)$ любого векторного поля вида $\alpha(t) \mathbf{r}(t)$ не изменяет правую часть уравнения (3) и потому неразличимо по данным $\langle \sigma_i \rangle(t)$.

Описанная неединственность может быть устранена, если доступны траектории $\mathbf{r}^{(k)}(t)$, полученные при различных начальных состояниях

$k = 1, \dots, K$. Для каждой траектории справедливо тождество, аналогичное (4):

$$\mathbf{r}^{(k)} \times \dot{\mathbf{r}}^{(k)} = 2(\|\mathbf{r}^{(k)}\|^2 \mathbf{a} - (\mathbf{r}^{(k)} \cdot \mathbf{a}) \mathbf{r}^{(k)}).$$

Сложив по k и введя

$$\mathbf{b} \equiv \sum_{k=1}^K \mathbf{r}^{(k)} \times \dot{\mathbf{r}}^{(k)}, \quad M \equiv 2 \sum_{k=1}^K (\|\mathbf{r}^{(k)}\|^2 I - \mathbf{r}^{(k)} \mathbf{r}^{(k)\top}), \quad (6)$$

получаем линейную систему

$$M \mathbf{a} = \mathbf{b}. \quad (7)$$

Если матрица M невырождена, то в рамках данной совокупности подготовок $\mathbf{a}(t)$ можно однозначно восстановить:

$$\mathbf{a}(t) = M(t)^{-1} \mathbf{b}(t). \quad (8)$$

Практическое условие достаточной информативности данных формулируется как невырожденность матрицы $M(t)$ для интересующих времён: это обычно достигается, если набор векторов $\{\mathbf{r}^{(k)}(t)\}_{k=1}^K$ содержит по крайней мере два (в общем случае — три) линейно независимые направления в \mathbb{R}^3 и их длины не близки к нулю.

2.5. Реализация Neural ODE

Рассмотрим динамику двухуровневой квантовой системы, описываемой вектором состояния

$$\psi(t) \in \mathbb{C}^2, \quad \|\psi(t)\|^2 = 1.$$

Эволюция системы задаётся уравнением Шрёдингера:

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = -iH(t)\psi(t), \quad (9)$$

где $H(t)$ — эрмитов гамильтониан, зависящий от времени (в единицах, где $\hbar = 1$).

Пространство эрмитовых 2×2 матриц образовано базисом, состоящим из единичной матрицы I и матриц Паули $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. Следовательно, любой гамильтониан можно записать в виде:

$$H(t) = a_0(t)I + a_x(t)\sigma_x + a_y(t)\sigma_y + a_z(t)\sigma_z, \quad (10)$$

где функции $a_\mu(t)$ определяют динамику системы.

Истинный гамильтониан задаётся аналитически следующими временными зависимостями:

$$\begin{aligned} a_0(t) &= 0.1 \sin(0.5t), & a_x(t) &= \cos(1.2t + 0.2), \\ a_y(t) &= 0.6 \sin(0.7t - 0.3), & a_z(t) &= 0.8 \cos(0.5t + 1.0). \end{aligned} \quad (11)$$

Эти функции определяют временную структуру коэффициентов при матрицах Паули в разложении (10). Такой гамильтониан эквивалентен гамильтониану спина $-\frac{1}{2}$ в переменном магнитном поле $\mathbf{B}(t)$:

$$H(t) = -\gamma \mathbf{B}(t) \cdot \mathbf{S} = \mathbf{a}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

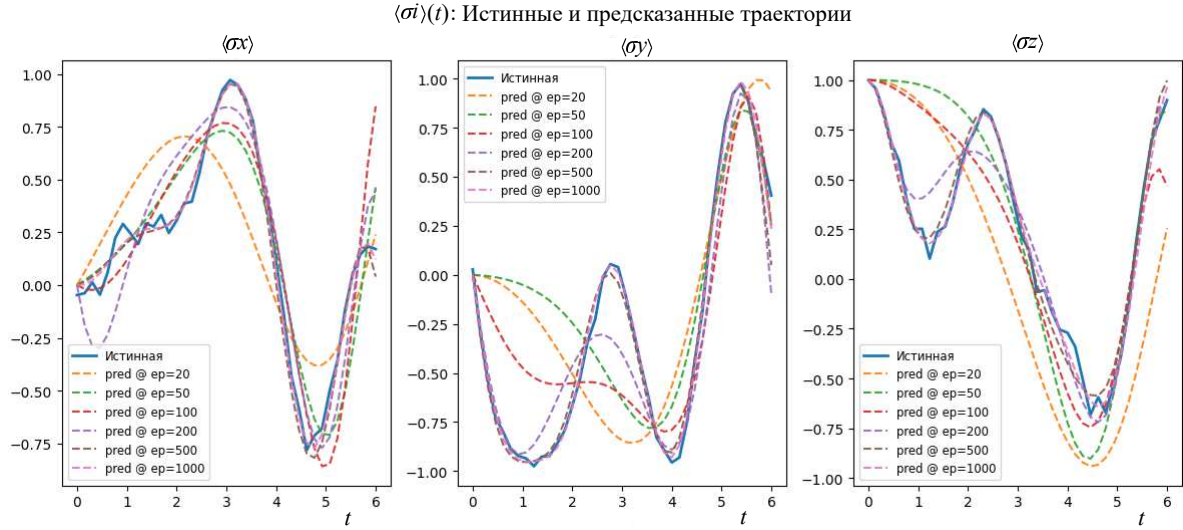


Рис. 1. Зависимость истинных и предсказанных средних значений операторов Паули

где $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ — оператор спина, а γ — гиромагнитное отношение [2, 3]. Таким образом, выбранные временные зависимости $a_\mu(t)$ моделируют осциллирующее магнитное поле, действующее на спин $-\frac{1}{2}$ частицу.

Для восстановления неизвестных функций $a_\mu(t)$ используется нейронная сеть типа TimeNet, реализующая отображение

$$t \mapsto [a_0(t), a_x(t), a_y(t), a_z(t)].$$

Далее гамильтониан $\tilde{H}(t)$, построенный по выходу сети, подставляется в уравнение (9), и проводится интегрирование с использованием той же схемы RK4.

Прямая минимизация разности между $\psi(t)$ и $\tilde{\psi}(t)$ не имеет смысла из-за глобальной фазовой неопределённости. Поэтому в качестве наблюдаемых величин используются средние значения операторов Паули:

$$\langle \sigma_i \rangle(t) = \langle \psi(t) | \sigma_i | \psi(t) \rangle.$$

Функция потерь определяется как среднеквадратичное отклонение предсказанных и истинных наблюдаемых:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{N} \sum_t \sum_{i \in \{x, y, z\}} (\langle \sigma_i \rangle_{\text{true}}(t) - \langle \sigma_i \rangle_{\text{pred}}(t))^2.$$

Оптимизация проводится методом Adam с шагом обучения 3×10^{-3} .

2.6. Результаты

Был написан код на языке Python (ссылка на репозиторий GitHub: <https://github.com/naumovas22-droid/Neural-ODE>), который реализует нейронное обыкновенное дифференциальное уравнение с использованием библиотеки PyTorch.

Результаты работы данного кода представлены на рис. 1–4.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе был предложен новый метод восстановления временно-зависимого гамильтониана двухуровневой квантовой системы на основе нейронной сети в схеме Neural ODE. Научная новизна подхода состоит в том, что, в отличие от известных методов, он непосредственно моделирует непрерывную эволюцию квантовой системы без прерывания эволюции. Нейросеть выдает временные зависимости коэффициентов гамильтониана, после чего интегратор уравнения Шрёдингера получает предсказанную траекторию. Предложенный метод показал высокую точность восстановления функции гамильтониана в экспериментальных численных примерах, обеспечивая надёжное совпадение предсказанных и истинных траекторий кубита. Преимущество Neural ODE-схемы заключается в естественной работе с непрерывным временем: не требуется искусственно дискретизировать эволюцию и метод сопряжённых переменных обеспечивает эффективное вычисление градиентов при обучении.

Перспективные направления дальнейших исследований включают применение разработанного подхода для калибровки квантовых симуляторов, адаптивной томографии и разработки схем квантового контроля. Например, методы гибридного квантово-классического обучения гамильтониана рассматриваются как инструмент сертификации квантовых устройств и симуляторов [8]. Непрерывные методы мониторинга эволюции могут быть интегрированы с адаптивной стратегией измерений для более эффективной томографии динамики. Уже сегодня отмечается широкая актуальность машинно-

Истинные и предсказанные коэффициенты гамильтониана

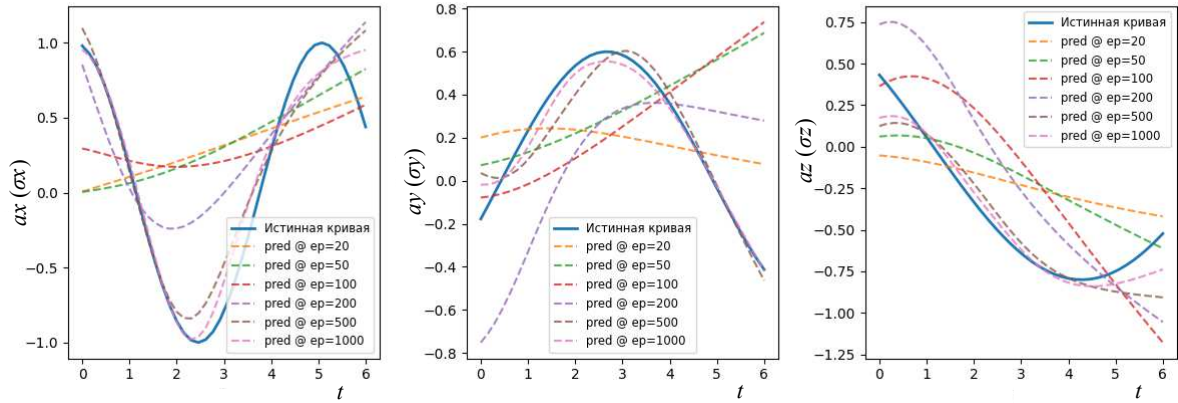


Рис. 2. Зависимость истинных и предсказанных значений коэффициентов гамильтониана от времени

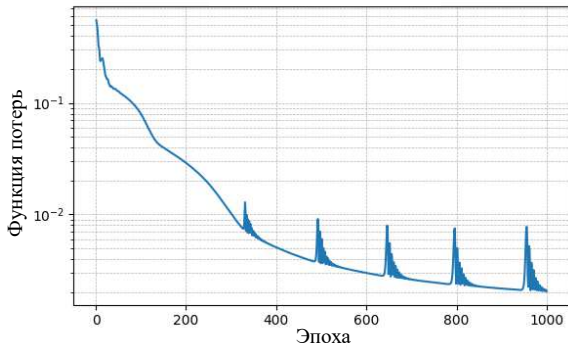


Рис. 3. Зависимость функции потерь нейросети от количества эпох

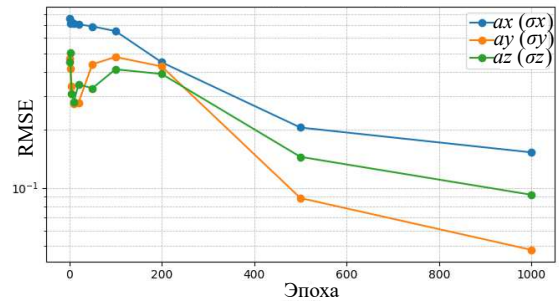


Рис. 4. Зависимость среднеквадратичной ошибки восстановления коэффициентов гамильтониана от количества эпох

го обучения динамики в задачах квантового управления и симуляции [5]. В будущем комбинация Neural ODE с квантовыми вычислениями (например, квантовыми дифференцируемыми симулято-

рами) открывает перспективы гибридных алгоритмов, где квантовая и классическая части будут совместно обучаться восстановлению динамики [15].

- [1] Chen R.T.Q., Rubanova Y., Bettencourt J., Duvenaud D.K. // [arXiv:1806.07366 \[cs.LG\]](#) (2018).
- [2] Siva K., Koolstra G., Steinmetz J. et al. // [PRX Quantum](#) **4**, 040324 (2023).
- [3] Han C.-D., Glaz B., Haile M., Lai Y.-C. // [Phys. Rev. A](#) **104**, 062404 (2021).
- [4] Cao Y., Jin S., Liu N. // [arXiv:2508.18326 \[quant-ph\]](#) (2025).
- [5] Choi M., Flam-Shepherd D., Kyaw T.H., Aspuru-Guzik A. // [arXiv:2110.10721 \[quant-ph\]](#) (2021).
- [6] Sakurai J.J., Napolitano J. Modern Quantum Mechanics. 2nd ed., Addison-Wesley, 2017.
- [7] Blum K. Density Matrix Theory and Applications. 3rd ed., Springer, 2012.
- [8] Wang Y., Li G., Wang X. // [Science China Information Sciences](#) **66**, 129502 (2023).

- [9] Newbury R., Collins J., He K. et al. // [arXiv:2407.05560 \[quant-ph\]](#) (2024).
- [10] Heightman T., Jiang E., Acin A. // [arXiv:2408.08639 \[quant-ph\]](#) (2024).
- [11] Li Y., Modi C., Jamieson D. et al. // [arXiv:2211.09815 \[quant-ph\]](#) (2022).
- [12] Yu W., Sun J., Han Z., Yuan X. // [Quantum](#) **7**, 1045 (2023).
- [13] Tucker K., Rege A.K., Smith C. et al. // [arXiv:2404.05526v2 \[quant-ph\]](#) (2024).
- [14] Kang Z., Li H., Wang S. et al. // [arXiv:2503.07356 \[quant-ph\]](#) (2025).
- [15] Wang Z., Wu F., Zhao H.-H. et al. // [Quantum](#) **9**, 1722 (2025).

Using Neural Differential Equations

A. S. Naumov^{1,a}, V. Yu. Popov^{2,b}

*Department of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
Moscow 119991, Russia*

E-mail: ^a naumov.as22@physics.msu.ru, ^b masterlu@mail.ru

The problem of reconstructing an unknown time-dependent Hamiltonian of a two-level quantum system from its observed dynamics is considered. A method based on a neural network in the Neural ODE framework is proposed, where the continuous evolution of the quantum state is modeled by integrating the Schrödinger equation with a parametric Hamiltonian model implemented by the network. The input data consist of measured time series of the expectation values of Pauli operators for a qubit. The network is trained by minimizing the difference between the experimentally observed and simulated trajectories of quantum observables. Using the example of spin dynamics in a time-varying magnetic field, it is shown that the proposed approach allows accurate reconstruction of the parameters of the time-dependent Hamiltonian without interrupting the quantum evolution. The results demonstrate that the Neural ODE model provides continuous handling of the time parameter and robust reconstruction of system dynamics under conditions of limited data and noise.

PACS: 03.65.Aa, 03.65.Ta, 03.65.Wj, 07.05.Mh, 02.30.Hq.

Keywords: neural networks, differential equations, quantum mechanics.

Received 01 November 2025.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2026. **81**, No. 1. Pp. .

Сведения об авторах

1. Наумов Арсений Станиславович — студент; e-mail: naumov.as22@physics.msu.ru.
2. Попов Виктор Юрьевич — доктор физ.-мат. наук, профессор; e-mail: masterlu@mail.ru.