ЛАНДШАФТЫ УПРАВЛЕНИЯ КВАНТОВЫМИ СИСТЕМАМИ

А.Н. Печень

Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

apechen@gmail.com

Поступила 26.08.2012

В общем случае задача управления квантовой системой может быть сформулирована как задача максимизации некоторого целевого функционала. Зависимость целевого функционала от управляющего воздействия определяет ландшафт управления, важными характеристиками которого являются критические точки, в том числе т.н. ловушки - локальные максимумы, не являющиеся глобальными, и ловушки второго рода - критические точки, не являющиеся глобальными максимумами, в которых гессиан целевого функционала отрицательно полуопределен. В докладе будет изложена история, последние результаты и открытые вопросы в области исследования ландшафтов управления как замкнутыми, так и открытыми квантовыми системами. В частности, для замкнутых систем будет показано существование при некоторых условиях ловушек второго рода, для открытых систем - сформулированы условия отсутствия ловушек в ландшафтах управления и указаны возможные следствия этих результатов.

УДК 517.977

Исследование математических вопросов управления квантовыми системами привлекает большой интерес исследователей в связи с многочисленными приложениями задач квантового управления в различных разделах физики и химии, от создания заданных молекулярных квантовых состояний и оптимального управления химическими реакциями с помощью лазеров до “лазерных ускорителей” и квантовой информации.

Во многих задачах можно ограничиться рассмотрением конечноуровневых квантовых систем, иногда с большим числом уровней, порядка $n = 10^4 - 10^6$. Состояние n-уровневой квантовой системы в момент времени t описывается матрицей плотности ρ_t, являющейся положительной матрицей (в общем случае с комплексными элементами) с единичным следом. Обозначим $\mathcal{D}_n = \{\rho \in \mathcal{M}_n := \mathbb{C}^{n\times n} \,|\, \rho \geq 0, \mathrm{Tr}\rho = 1\}$ (где Tr — след матрицы) множество всех матриц плотности n-уровневой системы.

В задачах квантового управления система эволюционирует под влиянием некоторого управляющего воздействия $u(t) \in \mathcal{U}$. Пусть $\rho_{u,T}$ — матрица плотности системы в заданный конечный момент времени T, эволюционирующая под воздействием управления $u(t)$ из некоторого начального состояния ρ_0. Широкий класс задач квантового управления описывается целевыми функционалами вида

$$J(u) = \langle O\rangle_T^u = \mathrm{Tr}[\rho_{u,T}O] \to \max \tag{1}$$

где O — самосопряжённый оператор (целевая наблюдаемая) системы. Данный функционал описывает задачу максимизации среднего значения наблюдаемой O в момент времени T. Частный случай $O = |\psi\rangle\langle\psi|$ соответствует важной задаче перевода системы в заданное конечное состояние $|\psi\rangle$.

Ландшафтом управления называется график целевого функционала. Пусть $J_{\max} = \max\limits_u J(u)$ — значение глобального максимума J. Важными точками ландшафта являются *оптимальные управления* — управления, соответствующие глобальным максимумам; *ловушки* — управления, являющиеся локальными максимумами J (со значениями $J(u) < J_{\max}$), и *ловушки второго порядка* — управления, являющиеся критическими точками J со значениями $J(u) < J_{\max}$, в которых гессиан $H = \delta^2 J/\delta u^2$ отрицательно полуопределён ($H \leq 0$). Количество и структура ловушек, в том числе второго порядка, в ландшафте управления влияет на сложность нахождения глобального максимума с использованием локальных алгоритмов, в связи с чем математическое исследование ландшафтов управления является важной актуальной задачей [1-5]. В докладе рассматриваются ландшафты управления, соответствующие целевым функционалам вида (1) для замкнутых и открытых квантовых систем.

Ландшафты управления для замкнутых квантовых систем. Если система не взаимодействует с окружением, то есть является замкнутой, то эволюция её матрицы плотности $\rho_{u,t} \in \mathcal{D}_n$ под действием управления $u(t)$ описывается уравнением

$$\frac{d\rho_{u,t}}{dt} = -i[H_0 + Vu(t), \rho_{u,t}], \qquad \rho_{u,t}\Big|_{t=0} = \rho_0 \tag{2}$$

Здесь H_0 и V — самосопряжённые операторы, ρ_0 — начальная матрица плотности системы, $u(t)$ — вещественная функция. Уравнение (2) индуцирует унитарное преобразование $\rho_0 \to \rho_{u,T} = U_{u,T}\rho_0 U_{u,T}^\dagger$. *Поднятием ландшафта* (на унитарную группу) называется отображение:

$$J(u) \to \widehat{J}(U) = \mathrm{Tr}[U\rho_0 U^\dagger O] \tag{3}$$

График функции $\widehat{J}(U)$ называется кинематическим ландшафтом целевого функционала $J(u)$; исходный ландшафт $J(u)$ называется динамическим. В [1] и ряде последующих работ данных авторов была доказана следующая теорема (доказательство для некоторых случаев содержится в работах фон Неймана [6] и Брокетта [7]).

Т е о р е м а 1. *Поднятие ландшафта $\tilde{J}(U)$ для замкнутых квантовых систем при любых ρ_0 и O не имеет ловушек; все его критичесские точки — глобальные максимумы, глобальные минимумы, и седловые точки (все перечислены).*

Регулярным управлением называется такое u, что дифференциал отображения $\chi : \mathcal{U} \to SU(n)$, $\chi(u) \to U_{u,T}$, невырожден. Из теоремы следует, что регулярные управления не являются ловушками для замкнутых квантовых систем. В [1] было сделано предположение о том, что и динамический ландшафт $J(u)$ для замкнутых квантовых систем обладает свойствами, исключающими существование ловушек, в том числе второго порядка. Однако, следующая доказанная в [5] теорема показывает существование ловушек второго порядка в динамическом ландшафте управления при широких предположениях на параметры системы.

Т е о р е м а 2. *Пусть в базисе $|i\rangle$ оператора H_0 существует пара $|i\rangle \neq |j\rangle$ такая, что $V_{ij} = \langle i|V|j\rangle = 0$. Тогда существуют ρ_0 и O, для которых управление $u(t) \equiv 0$ является ловушкой второго порядка для динамического ландшафта $J(u)$.*

Теорема обобщается на произвольные ненулевые постоянные управления. Доказательство использует явные выражения для градиента и гессиана функционала $J(u)$, с помощью которых путем вычислений показывается, что постоянные управления являются ловушками второго порядка [5].

Ландшафты управления для открытых квантовых систем. Если система взаимодействует с окружением, то её эволюция является неунитарной и описывается мастер-уравнением вида

$$\frac{d\rho_t}{dt} = -i[H_0 + Vu(t), \rho_t] + \mathcal{L}(\rho_t), \qquad L_i \in \mathcal{M}_n$$

где $\mathcal{L}$ — некоторый супероператор (то есть оператор, действующий в пространстве матриц), описывающий влияние окружения и определяющий негамильтоновы аспекты динамики. В случае марковской динамики действие супероператора $\mathcal{L}$ имеет вид

$$\mathcal{L}(\rho) = \sum_i \Big(2L_i \rho L_i^\dagger - L_i^\dagger L_i \rho - \rho L_i^\dagger L_i \Big)$$

В общем случае супероператор $\mathcal{L}$ может зависеть от когерентного управления $u(t)$ и от параметров резервуара, определяющих так называемое некогерентное управление. Например, если резервуаром является поле некогерентных фотонов, то параметр некогерентного управления есть плотность числа фотонов $n_{\mathbf{k},\alpha}$ с импульсом $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$ и поляризацией $\alpha \in \{0,1\}$. Если резервуаром является газ атомов или молекул, то параметром некогерентного управления является плотность атомов (молекул) $n_{\mathbf{k},\alpha}$ в состоянии $|\mathbf{k},\alpha\rangle$ с импульсом $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$ и внутренним квантовым числом α. В этих случаях управлением является пара $(u, n_{\mathbf{k},\alpha})$ [8,9].

Мастер-уравнение индуцирует в общем случае неунитарную вполне положительную динамику

$$\rho_0 \to \rho_t = \Phi_t(\rho_0)$$

где Φ_t — вполне положительное сохраняющее след отображение. Отображение $\Phi : \mathcal{M}_n \to \mathcal{M}_n$ называется вполне положительным, если отображение $\Phi \otimes \mathbb{I}_k : \mathcal{M}_n \otimes \mathcal{M}_k \to \mathcal{M}_n \otimes \mathcal{M}_k$ положительно для любого $k = 1, 2, 3, \ldots$. Отображение сохраняет след, если $\mathrm{Tr}\Phi(A) = \mathrm{Tr}(A)$ для любого $A \in \mathcal{M}_n$.

Любое вполне положительное сохраняющее след отображение можно представить в виде $\Phi(\rho) = \sum_i K_i \rho K_i^\dagger$, где $\sum_i K_i^\dagger K_i = \mathbb{I}_n$. Соответственно, эволюцию открытой квантовой системы можно представить как $\rho_0 \to \rho_{u,T} = \sum_{i=1}^{n^2} K_{u,i}\rho_0 K_{u,i}^\dagger$, где матрицы $K_{u,i} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ зависят от управления и удовлетворяют условию

$$\sum_{i=1}^{n^2} K_{u,i}^\dagger K_{u,i} = \mathbb{I}_n \tag{4}$$

Данное условие означает, что множество $\{K_{u,i}\}_{i=1}^{n^2}$ можно отождествить с точкой комплексного многообразия Штифеля $V_n(\mathbb{C}^{n^3})$ (многообразие Штифеля $V_l(\mathbb{C}^k)$ можно определить как множество $k\times l$ матриц S, удовлетворяющих условию $S^\dagger S = \mathbb{I}_l$). Действительно, построим $n^3 \times n$ матрицу S как столбец матриц $K_1, \dots K_{n^2}$. Тогда условие (4) означает, что $S^\dagger S = \mathbb{I}_n$. Отметим, что представление $\Phi(\rho) = \sum_i K_i\rho K_i^\dagger$ не единственно. Существуют различные физически эквивалентные множества $\{K_{u,i}\}_{i=1}^{n^2}$, так что вполне положительные сохраняющие след отображения следует отождествлять с точками фактор-многообразия $W_n = V_n(\mathbb{C}^{n^3})/\sim$ по данному отношению эквивалентности.

Для открытых квантовых систем поднятием ландшафта называется отображение

$$J(u) = \mathrm{Tr}[\rho_T^u O] \Longrightarrow \widehat{J}(S) = \mathrm{Tr}\left[S\rho_0 S^\dagger(\mathbb{I}_{n^2}\otimes O)\right] \equiv \mathrm{Tr}\Big[\sum_{i=1}^{n^2} K_i\rho_0 K_i^\dagger O\Big] \tag{5}$$

Т е о р е м а 3. *Поднятие ландшафта* (5) *не имеет ловушек при любых* ρ_0 *и* O. *Все его критические точки — глобальные максимумы, минимумы, и седловые точки, число и расположение которых зависят от степени вырождения матриц* ρ_0 *и* O.

Доказательство для $n = 2$ содержится в [3]. Случай общего n рассмотрен в [4]. Из Теоремы 3 следует, что регулярные управления не являются ловушками также и для открытых квантовых систем. Исследование сингулярных управлений для открытых квантовых систем является полностью открытой задачей.

БЛАГОДАРНОСТИ: Работа поддержана грантом РФФИ 11-01-12114-офи-м-2011, грантом НШ-2928.2012.1 и Marie Curie International Incoming Fellowship 7-й Рамочной Программы ЕС.

Литература

1. *Rabitz H., Hsieh M., Rosenthal C.* Quantum optimally controlled transition landscapes // Science, 2004, **303,** 1998-2001.
2. *de Fouquieres P., Schirmer S.G.* Quantum control landscapes: a closer look // Preprint arXiv:1004.3492.
3. *Pechen A.N., Prokhorenko D., Wu R., Rabitz H.* Control landscapes for two-level open quantum systems // J. Phys. A: Math. Theor., 2008, **41,** 045205.
4. *Wu R., Pechen A.N., Rabitz H., Hsieh M., Tsou B.* Control landscapes for observable preparation with open quantum systems // J. Math. Phys., 2008, 49, 022108.
5. *Pechen A.N., Tannor D.J.* Are there traps in quantum control landscapes? // Phys. Rev. Lett., 2011, **106,** 120402.
6. *von Neumann J.* Some matrix-inequalities and metrization of matric-space // Tomsk Univ. Rev., 1937, 1, 286-300.
7. *Brockett R.* Least squares matching problems // Lin. Alg. Appl., 1989, **122/123/124,** 761-777.
8. *Pechen A., Rabitz H.* Teaching the environment to control quantum systems // Phys. Rev. A, 2006, 73, 062102.
9. *Pechen A.* Engineering arbitrary pure and mixed quantum states // Phys. Rev. A, 2011, 84, 042106.

CONTROL LANDSCAPES FOR QUANTUM SYSTEMS

A.N. Pechen

Steklov Mathematical Institute RAS

apechen@gmail.com

Received 26.08.2012

Various quantum control problems can be formulated as maximizing objectives which are functionals of the control. The functional dependence of the objective determines the control landscape whose important features are traps (i.e., local maxima which are not globally optimal) and second order traps (i.e., critical points with negative semidefinite Hessian which are not global maxima). We will outline history, recent results and open problems in this area. In particular, we will show the existence of second order traps for closed systems and discuss the conditions for absence of traps for open systems.