О критических точках целевого функционала в задаче максимизации наблюдаемых кубита

А. Н. Печень, Н. Б. Ильин

Изолированная от окружения n-уровневая управляемая квантовая система описывается уравнением Шрёдингера для унитарного оператора эволюции U_t:

$$i\frac{dU_t}{dt} = (H_0 + f(t)V)U_t, \qquad U_{t=0} = \mathbb{I}. \tag{1}$$

Здесь H_0 и V – эрмитовы $(n \times n)$-матрицы и $f(t) \in L^1([0,T];\mathbb{R})$ – управление. Предполагается, что $[H_0, V] \neq 0$. Требуется найти $f(t)$, которая максимизирует целевой функционал $\mathscr{J}_A[f] = \operatorname{Tr}(U_T\rho_0 U_T^\dagger A)$, где ρ_0 – начальная матрица плотности системы, A – эрмитова матрица и $T > 0$ – конечное время. Функционал $\mathscr{J}_A$ описывает среднее значение наблюдаемой A в момент времени T. Важной проблемой является анализ локальных максимумов целевого функционала, называемых ловушками [1]–[3], так как ловушки, если они существуют, затрудняют поиск глобально оптимальных решений. В работах [1], [2] высказано предположение об отсутствии ловушек в типичных задачах управления квантовыми системами. В работах [4], [5] доказано отсутствие ловушек для двухуровневых квантовых систем при достаточно больших T. В работе [5] доказано следующее утверждение.

Теорема 1. *Если* $\operatorname{Tr} V = 0$ *и* $T \geqslant T_0$, *где* $T_0 = \pi/\|H_0 - (1/2)\operatorname{Tr} H_0 + f_0 V\|$ *и* $f_0 = -\operatorname{Tr}(H_0V)/\operatorname{Tr}(V^2)$, *то все максимумы целевого функционала* $\mathscr{J}_A$ *– глобальные.*

Из результатов работы [5] следует, что никакое управление $f \neq f_0$ не является ловушкой для любого $T > 0$. Таким образом, только управление $f = f_0$ может быть ловушкой при малых T.

Далее рассматривается частный случай уравнения Шрёдингера (1) вида:

$$i\frac{dU_t}{dt} = (\sigma_z + f(t)(v_x\sigma_x + v_y\sigma_y))U_t. \tag{2}$$

Здесь σ_x, σ_y, σ_z – матрицы Паули. В этом случае $f_0 = 0$ и $T_0 = \pi$. В [6] доказано, что ловушки в рассматриваемой системе возможны при малых T, но только если векторы $\mathbf{r}^0 = \operatorname{Tr}(\rho_0\boldsymbol{\sigma})$, $\mathbf{a} = \operatorname{Tr}(A\boldsymbol{\sigma})$ и $\mathbf{v} = (1/2)\operatorname{Tr}(V\boldsymbol{\sigma})$ $(\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z))$ лежат в плоскости, ортогональной вектору $\mathbf{h}_0 = \operatorname{Tr}(H_0\boldsymbol{\sigma})$. В работе [6] доказан следующий результат.

Теорема 2. *Пусть* $[(\mathbf{v}\times\mathbf{r}^0)_z\cos 2T + (\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}^0)\sin 2T](\mathbf{v}\times\mathbf{a})_z > 0$ *и* $(\mathbf{r}^0\times\mathbf{a})_z\cos 2T < (\mathbf{r}^0\cdot\mathbf{a})\sin 2T$, *а векторы* $\mathbf{r}^0$, $\mathbf{a}$ *и* $\mathbf{v}$ *лежат в плоскости, ортогональной вектору* $\mathbf{h}_0$. *Тогда существует такое* T_1, *что для всех* $T \leqslant T_1$ *управление* $f(t) = 0$ *является ловушкой для задачи максимизации целевого функционала* $\mathscr{J}_A$.

Несмотря на этот результат, проблема анализа ловушек для двухуровневых систем не была решена до конца. Так, для системы (2) согласно теореме 1 ловушки отсутствуют для всех $T \geqslant T_0 = \pi$ и согласно теореме 2 ловушки существуют для всех $T \leqslant T_1$, причем величина T_1 не конкретизируется. Ниже мы доказываем, что нижнюю границу на T для отсутствия ловушек можно уменьшить.

Теорема 3. *При* $T > \pi/2$ *управление* $f = 0$ *не является ловушкой в задаче максимизации целевого функционала* $\mathscr{J}_A$ *для системы* (2).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14-50-00005).

DOI: 10.4213/rm9663

Для того чтобы доказать, что управление $f=0$ не ловушка, покажем, что если $f=0$ – критическая точка, то это либо глобальный экстремум, либо седловая точка. В последнем случае достаточно убедиться, что гессиан в точке $f=0$ не знакоопределен. В работе [6] доказано, что управление $f=0$ может оказаться ловушкой, только если векторы $\mathbf{r}^0$, $\mathbf{a}$ и $\mathbf{v}$ лежат в плоскости, ортогональной вектору $\mathbf{h}_0$. При этом условии на векторы $\mathbf{r}^0$, $\mathbf{a}$ и $\mathbf{v}$ в [5] получено выражение для гессиана в точке $f=0$ через векторы $\mathbf{r}=\operatorname{Tr}(U_T\rho U_T^\dagger\boldsymbol{\sigma})$ и $\mathbf{r}_t=\sin(2t-\phi)\mathbf{e}_x+\cos(2t-\phi)\mathbf{e}_y$, где $\phi=\arctan(v_y/v_x)$:

$$
\begin{gathered}
(f,Hf)=\int_0^T\!\!\int_0^T f(t_1)f(t_2)\operatorname{Hess}_f \mathscr{J}_A(t_2,t_1)\,dt_1\,dt_2,\\
\operatorname{Hess}_f \mathscr{J}_A(t_2,t_1)=\begin{cases}-\dfrac{v^2}{4}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_{t_2})(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_{t_1}), & t_2\geqslant t_1,\\ -\dfrac{v^2}{4}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_{t_1})(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_{t_2}), & t_2<t_1.\end{cases}
\end{gathered}
\tag{3}
$$

Рассмотрим вспомогательную функцию

$$
\delta_\varepsilon(t)=\begin{cases}0, & |t|\geqslant\varepsilon/2,\\ 1/\varepsilon\,, & |t|\leqslant\varepsilon/2.\end{cases}
\tag{4}
$$

Тогда для всех $f\in \mathrm{C}[0,T]$ и всех $t\in(\varepsilon/2,T-\varepsilon/2)$, $\varepsilon<T$, имеем $\displaystyle\int_0^T\delta_\varepsilon(\tau-t)f(\tau)\,d\tau=f(t)+O(\varepsilon)$. Пусть $f_\lambda(t)=\delta_\varepsilon(t-\lambda)$, $\varepsilon/2<\lambda<T-\varepsilon/2$. Подставляя функцию $f_\lambda(t)$ в выражение для гессиана (3), получим $(f_\lambda,Hf_\lambda)=-(v^2/4)(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_\lambda)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_\lambda)+O(\varepsilon)$, где

$$
(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_\lambda)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_\lambda)=\frac{|\mathbf{r}|\,|\mathbf{a}|}{2}\bigl(\cos(\phi_1-\phi_2)-\cos(4\lambda-2\phi+\phi_1+\phi_2)\bigr).
\tag{5}
$$

Здесь $\phi_1=\arctan(r_y/r_x)$, $\phi_2=\arctan(a_y/a_x)$. Если $\cos(\phi_1-\phi_2)\neq\pm1$, то из формулы (5) вытекает, что функция $(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_\lambda)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_\lambda)$ принимает значения разных знаков на отрезке $[0,\pi/2]$. В этом случае выбираем λ_1 и λ_2 так, чтобы $(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_{\lambda_1})(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_{\lambda_1})<0$ и $(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_{\lambda_2})(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_{\lambda_2})>0$, и затем выбираем ε настолько малым, чтобы знак (f_λ,Hf_λ) определялся знаком $(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}_\lambda)(\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}_\lambda)$. Тогда $(f_{\lambda_1},Hf_{\lambda_1})>0$ и $(f_{\lambda_2},Hf_{\lambda_2})<0$, т.е. гессиан в точке $f=0$ не является знакоопределенной функцией. В этом случае управление $f=0$ является седловой точкой. Если же $\cos(\phi_1-\phi_2)=\pm1$, то векторы $\mathbf{r}$ и $\mathbf{a}$ параллельны. Тогда $\mathscr{J}_A[0]=(1\pm|\mathbf{a}|\,|\mathbf{r}|)/2$, что является глобальным экстремумом целевого функционала.

Список литературы

[**1**] H. A. Rabitz, M. M. Hsieh, C. M. Rosenthal, *Science*, **303**:5666 (2004), 1998–2001. [**2**] T.-S. Ho, H. Rabitz, *J. Photochem. Photobiol. A*, **180**:3 (2006), 226–240. [**3**] P. de Fouquieres, S. G. Schirmer, *Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.*, **16**:3 (2013), 1350021. [**4**] A. Pechen, N. Il'in, *Phys. Rev. A*, **86**:5 (2012), 052117. [**5**] А. Н. Печень, Н. Б. Ильин, Тр. МИАН, **285**, 2014, 244–252. [**6**] А. Печень, Н. Ильин, Тр. МИАН, **289**, 2015, 227–234.

А. Н. Печень (A. N. Pechen)
Математический институт им. В. А. Стеклова
Российской академии наук
E-mail: pechen@mi.ras.ru

Представлено А. Г. Сергеевым
Принято редколлегией
10.04.2015

Н. Б. Ильин (N. B. Il'in)
Математический институт им. В. А. Стеклова
Российской академии наук
E-mail: ilyn@mi.ras.ru