А. Ю. Горнов, А. В. Двуреченский, Т. С. Зароднюк, А. Ф. Зиновьева, А. В. Ненашев

Вычислительная технология оптимизации двумерного управляющего импульса напряжения в системе квантовых точек

Аннотация. Рассматривается задача оптимизации управляющего импульса напряжения, представленного парой зависящих от времени функций, при проведении операции обмена спиновой информации в системе двух вертикально совмещенных слоев туннельно-связанных полупроводниковых квантовых точек. Поставлена и численно решена эквивалентная задача оптимального управления с терминальными ограничениями и функционалом быстродействия.

Kлючевые слова u фразы: задача оптимального управления, численные методы, квантовая точка.

Введение

Преимущества использования квантовых точек (КТ) для разработки элементной базы квантового компьютера по сравнению с иными методами заключаются в возможности управления их геометрическими параметрами и расположением. Для выполнения квантовых вычислений в работе предлагается использование двух вертикально совмещенных слоев КТ в системе «германий–кремний». Осуществление обмена информацией с помощью спиновых переменных позволяет реализовать управляющие воздействия путем приложения внешних электромагнитных полей.

Рассматриваются две ячейки квантового компьютера, основу которых составляют четыре туннельно-связанные полупроводниковые КТ. В начальный момент заполнены электронами две нижние

Работа поддержана РФФИ (грант № 10-01-00595) и междисциплинарным интеграционным проектом СО РАН № 43.

[©] ПРОГРАММНЫЕ СИСТЕМЫ: ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ, 2011

точки, в каждой из которых находится по одному носителю заряда (рис. 1, а). Размеры и плотность квантовых точек выбираются так, чтобы в нижнем слое не было туннельного взаимодействия между точками, а в верхнем слое они имели достаточную для проведения квантовых логических операций туннельную связь. Импульс напряжения, приложенный к металлическим затворам, расположенным над КТ, вызывает туннелирование электронов из нижних точек в верхние (рис. 1, б). Переход частиц в верхний слой инициирует операцию обмена спиновой информации — SWAP [1]; при этом предполагается, что туннельная связь в верхнем слое КТ на несколько порядков выше, чем в нижнем слое.

Задача заключается в определении оптимальной формы и длительности импульса напряжения для проведения операции SWAP. Другими словами, если до приложения импульса напряжения в левой точке находится электрон со спином «вверх», а в правой точке — электрон со спином «вниз», то после приложения импульса в левой точке должен находиться электрон со спином «вниз», а в правой — электрон со спином «вверх». Критериями оптимизации являются минимумы вероятности ошибки нахождения электронов в определенных точках и изменения энергии управления.

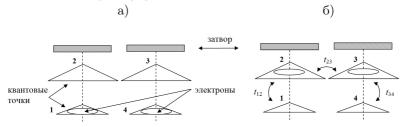


Рис. 1. а) Схема расположения двух ячеек для проведения логических операций в системе с квантовыми точками; б) смещение электронов в верхние квантовые точки за счет импульсного воздействия напряжения.

1. Постановка задачи оптимального управления

Для описания управляемых переходов электронов в системе вертикально расположенных квантовых точек использовано нестационарное уравнение Шредингера с потенциалом, зависящим от времени. Математическая модель исследуемого объекта сформулирована

как билинейная управляемая система дифференциальных уравнений [2]:

(1)
$$\frac{dx}{dt} = A_0(u)x(t).$$

Матрица $A_0(u)$ размерности 32×32 имеет вид

$$A_0(u) = \begin{pmatrix} 0 & A(u) \\ -A(u) & 0 \end{pmatrix},$$

здесь управляющее воздействие является векторной функцией времени u=u(t), причем $u_i(t)=de_i(t)/dt, i=\overline{1,4}$, матрица A(u) предствима в виде суммы матриц B(u) и $C\colon A(u)=B(u)+C$, где

И

— матрицы B(u) и C соответственно. Необходимо осуществить перевод системы из точки

$$x(t_0) = x_j^0 = \begin{cases} 1, & \text{если } j = 3,9\\ 0, & \text{если } j \neq 3,9 \end{cases}$$

в точку

$$x(t_1) = x_j^1 = \begin{cases} 1, & \text{если } j = 3 \\ -1, & \text{если } j = 9, \\ 0, & \text{если } j \neq 3, 9 \end{cases}$$

где $j = \overline{1,32}$.

Исследуемый динамический процесс определен на интервале $T=[t_0,t_1]$. Под фазовыми координатами понимается вектор $x_j=x_j(t),$ $j=\overline{1,32},$ составленный из действительных и мнимых частей амплитуд вероятностей 16-ти состояний, являющихся базисом в пространстве состояний двух электронов с суммарным спином 0 в системе четырех туннельно-связанных квантовых точек. В качестве управляющего воздействия выступает изменение энергии u=u(t), необходимое для осуществления перемещения электронов между квантовыми точками. Значение энергий в начальный момент времени фиксировано: $e_i(t_0)=0.1, i=\overline{1,4}.$ Заданы значения параметров модели: туннельных интегралов $t_{12}=t_{23}=t_{34}=0.001$ и энергия кулоновского взаимодействия внутри точки V=0.03, энергии кулоновского взаимодействия между точками по вертикали $V_{12}=V_{34}=0.01$ и между точками по горизонтали $V_{14}=V_{23}=0.005$ и $V_{13}=V_{24}=0.0045.$ Все энергии приводятся в электронвольтах.

Необходимо минимизировать ошибку, с которой система (1) переходит из начального состояния (2) в конечное состояние (3), при минимуме затрачиваемой энергии. Сформулирован соответствующий функционал, содержащий две взвешенные составляющие — изменение управляющего воздействия на всем интервале времени и отклонение траектории системы от терминальных ограничений:

(4)
$$I(u) = s_1 \int_{t_0}^{t_1} u^2 dt + s_2 \left((x_3(t_1) - 1)^2 + (x_9(t_1) + 1)^2 + \sum_{j \in K} x_j^2(t_1) \right) \to min,$$

где $K = \{1, 2, \overline{4, 8}, \overline{10, 32}\}$. Рассмотрены варианты задачи с различными значениями коэффициентов s_1 и s_2 , энергии $e_1(t)$ и $e_4(t)$ полагались равными нулю. Первые расчеты проводились для случая, в котором $e_2(t) = e_3(t)$. Далее рассмотрены задачи оптимального

управления с двумя управляющими воздействиями $e_2(t)$ и $e_3(t)$ и функционалом быстродействия $(I(u)=t_1\to min).$

2. Вычислительная технология

Решение поставленной задачи проведено с использованием алгоритмов, реализованных в программных комплексах ОРТСОN-I и ОРТСОN-III [3–7]. Однако, как и во многих практических задачах, результат не удалось получить по стандартным расчетным схемам и потребовалось разработать специализированную вычислительную технологию, учитывающую особенности оптимизационной модели.

Первой проблемой, проявившейся при численном решении задачи, явилась чрезвычайно медленная сходимость алгоритмов. По выполненным нами оценкам использование метода «грубой силы»—запуска алгоритмов на длительный срок без диалогового воздействия, потребовало бы неприемлемо большого времени решения — недель или, возможно, месяцев астрономического времени для расчета одного варианта задачи. Преодоление этой вычислительной проблемы привело к необходимости применения специализированной расчетной методики, основанной на методе продолжения по параметру (см. [8]). Один параметр вводится в правые части системы дифференциальных уравнений $\dot{\bar{x}} = p_1 f(x, u, t)$, второй p_2 используется для масштабирования энергий кулоновского взаимодействия $\overline{V}=p_2V$, $\overline{V}_{12}=p_2V_{12},\ \overline{V}_{34}=p_2V_{34},\ \overline{V}_{14}=p_2V_{14},\ \overline{V}_{23}=p_2V_{23},\ \overline{V}_{13}=p_2V_{13}$ и $\overline{V}_{24} = p_2 V_{24}$. Вычислительный эксперимент на небольшом временном интервале с увеличенными на порядок значениями энергий позволяет получить хорошее приближение для выполнения следующего расчета. Таким образом, сформирована двухпараметрическая последовательность задач оптимального управления и найдена стратегия продолжения по векторному параметру, позволившая, начиная с решения несложных начальных задач, постепенно в диалоговом режиме перейти к решению задач в исходной постановке, учитывая опыт, наработанный алгоритмами на предыдущих стадиях.

На следующем этапе исследована овражность оптимизируемых функционалов. Анализ последовательностей значений целевого функционала на генерируемых алгоритмами управлениях позволяет сделать вывод о высокой степени разномасштабности траекторий системы. Это выражается в периодическом замедлении сходимости алгоритмов, иногда до уровня ошибок дискретизации системы, и неожиданных скачках значения функционала в некоторые моменты

расчетов. Для достижения регулярного вычислительного процесса вводятся дополнительные параллелепипедные ограничения на u(t). Полученное на первом этапе приближение используется в качестве начального на следующей стадии вычислительного процесса. Манипуляция со вспомогательными ограничениями позволяет получить последовательность управлений, сходящихся к оптимальному в исходной постановке задачи.

Отрицательными оказались результаты тестирования системы на предмет вырожденности и жесткости— этих свойств в исследуемой модели не обнаружено. Комбинация рассмотренных выше особенностей позволяет классифицировать поставленные задачи как экстремальные задачи высокой сложности.

3. Численные эксперименты

Выполнена многоэтапная серия численных расчетов (более 100) по минимизации сформированного функционала и исследованию зависимости системы от изменения значений туннельных интегралов.

К первому типу решавшихся проблем относится поиск значений параметров p_1 и p_2 , способных придать модели требуемые свойства (параметрическая идентификация). Задачи указанного типа решались совместно с экспертами в диалоговом режиме, что позволило значительно сократить реальное время вычислений за счет ранней диагностики неадекватного поведения модели на основе визуального анализа траекторий. Установлена контринтуитивная взаимосвязь некоторых параметров системы, что предоставило возможность уменьшить размерность идентифицируемого вектора параметров и ограничить области физически допустимых значений.

На этапе рассмотрения задач перевода системы из точки в точку при фиксированном времени исследованы возможности имеющихся в программных комплексах автоматизированных алгоритмов учета терминальных ограничений и найдены эффективно работающие их варианты [4]. На рис. 2 представлены результаты одного из расчетов—оптимальное скалярное управление u=u(t) и форма управляющего импульса напряжения $e=e_2(t)=e_3(t)$, позволяющего осуществить логическую операцию информационного обмена.

Вероятности нахождения частицы со спином «вниз» («вверх») в каждой из четырех квантовых точек при проведении операции логического обмена (рис. 3) определялись по следующим формулам

$$P_1^{\uparrow} = \frac{1}{4} \left((x_1 + x_7)^2 + (x_{17} + x_{23})^2 + (x_2 + x_8)^2 + (x_{18} + x_{24})^2 \right) +$$

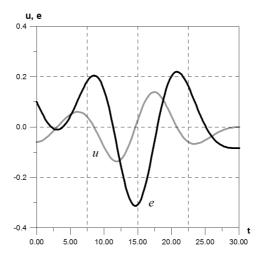


Рис. 2. Скалярное оптимальное управление u и управляющий импульс напряжения e.

$$\begin{split} & + \frac{1}{4} \left((x_3 + x_9)^2 + (x_{19} + x_{25})^2 \right) + \frac{1}{2} (x_{13}^2 + x_{29}^2), \\ P_1^{\downarrow} &= \frac{1}{4} \left((x_1 - x_7)^2 + (x_{17} - x_{23})^2 + (x_2 - x_8)^2 + (x_{18} - x_{24})^2 \right) + \\ & + \frac{1}{4} \left((x_3 - x_9)^2 + (x_{19} - x_{25})^2 \right) + \frac{1}{2} (x_{13}^2 + x_{29}^2), \\ P_4^{\uparrow} &= \frac{1}{4} \left((x_3 - x_9)^2 + (x_{19} - x_{25})^2 + (x_5 - x_{11})^2 + (x_{21} - x_{27})^2 \right) + \\ & + \frac{1}{4} \left((x_6 - x_{12})^2 + (x_{22} - x_{28})^2 \right) + \frac{1}{2} (x_{16}^2 + x_{32}^2), \\ P_4^{\downarrow} &= \frac{1}{4} \left((x_3 + x_9)^2 + (x_{19} + x_{25})^2 + (x_5 + x_{11})^2 + (x_{21} + x_{27})^2 \right) + \\ & + \frac{1}{4} \left((x_6 + x_{12})^2 + (x_{22} + x_{28})^2 \right) + \frac{1}{2} (x_{16}^2 + x_{32}^2), \end{split}$$

для нижних квантовых точек с номерами 1 и 4,

$$\begin{split} P_2^{\uparrow} &= \frac{1}{4} \left((x_1 - x_7)^2 + (x_{17} - x_{23})^2 + (x_4 + x_{10})^2 + (x_{20} + x_{26})^2 \right) + \\ &\quad + \frac{1}{4} \left((x_5 + x_{11})^2 + (x_{21} + x_{27})^2 \right) + \frac{1}{2} (x_{14}^2 + x_{30}^2), \\ P_2^{\downarrow} &= \frac{1}{4} \left((x_1 + x_7)^2 + (x_{17} + x_{23})^2 + (x_4 - x_{10})^2 + (x_{20} - x_{26})^2 \right) + \\ &\quad + \frac{1}{4} \left((x_5 - x_{11})^2 + (x_{21} - x_{27})^2 \right) + \frac{1}{2} (x_{14}^2 + x_{30}^2), \\ P_3^{\uparrow} &= \frac{1}{4} \left((x_2 - x_8)^2 + (x_{18} - x_{24})^2 + (x_4 - x_{10})^2 + (x_{20} - x_{26})^2 \right) + \\ &\quad + \frac{1}{4} \left((x_6 + x_{12})^2 + (x_{22} + x_{28})^2 \right) + \frac{1}{2} (x_{15}^2 + x_{31}^2), \\ P_3^{\downarrow} &= \frac{1}{4} \left((x_2 + x_8)^2 + (x_{18} + x_{24})^2 + (x_4 + x_{10})^2 + (x_{20} + x_{26})^2 \right) + \\ &\quad + \frac{1}{4} \left((x_6 - x_{12})^2 + (x_{22} - x_{28})^2 \right) + \frac{1}{2} (x_{15}^2 + x_{31}^2), \end{split}$$

для верхних квантовых точек с номерами 2 и 3 (см. рис. 1).

Рассмотренная постановка задачи оптимизации управляющего импульса напряжения для проведения логической операции обмена спиновой информации является первым наиболее простым вариантом, примененным для предварительного анализа исследуемого процесса.

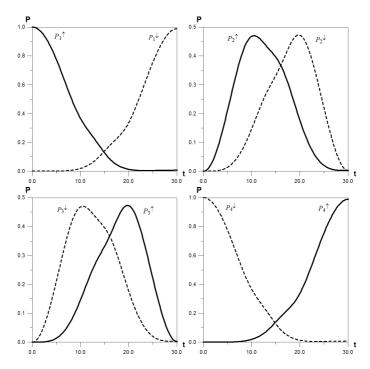


Рис. 3. Изменение со временем вероятности нахождения частицы со спином «вниз» P_k^{\downarrow} («вверх» P_k^{\uparrow}) в каждой из четырех квантовых точек $(k=\overline{1,4})$ при $t\in[0,30]$.

В более сложном варианте задачи логическая операция обмена рассматривалась на больших интервалах времени с двумя управляющими воздействиями $e_2(t)$ и $e_3(t)$. Сформулирована задача перевода элементарных частиц с разными спинами из нижних КТ в верхние с последующим обменом между точками с номерами 2 и 3. Вероятности нахождения электронов в нижних точках близки к нулю, а в верхних—к единице (рис. 4). Установлено, что существование туннельной

связи между KT по вертикали ведет к возникновению дополнительных ошибок при проведении операции обмена спиновой информацией для электронов в верхнем слое.

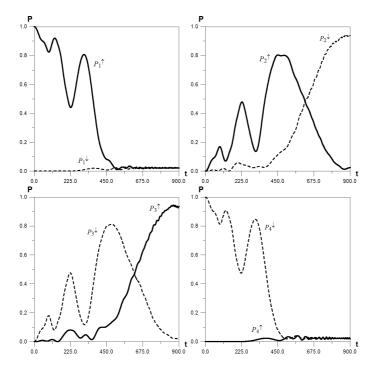


Рис. 4. Изменение со временем вероятности нахождения частицы со спином «вниз» P_k^{\downarrow} («вверх» P_k^{\uparrow}) в каждой из четырех квантовых точек $(k=\overline{1,4})$ при $t\in[0,900]$.

Самыми трудоемкими оказались решения задач быстродействия с векторным управлением. Для этого были использованы три известные расчетные методики исследования задач рассматриваемого типа: две, основанные на последовательности терминальных задач с фиксированным временем (с ростом и уменьшением интервала времени), и методика параметризации системы дифференциальных уравнений. Решения задачи быстродействия, найденные тремя принципиально различными методами, совпали, что позволило оценить достоверность полученного результата. Предоставленная экспертами оценка

времени быстродействия — около 1500 единиц, в результате проведения серии вычислительных экспериментов значительно улучшена — оптимальное значение времени быстродействия оказалось равным 606 относительным единицам. Графики соответствующего решения приведены на рис. 5.

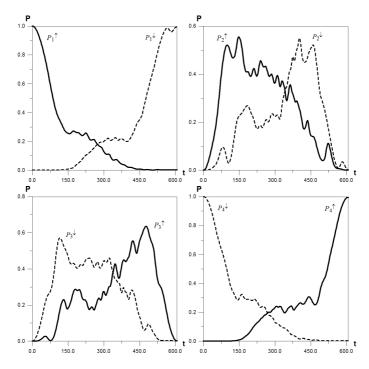


Рис. 5. Изменение со временем вероятности нахождения частицы со спином «вниз» P_k^{\downarrow} («вверх» P_k^{\uparrow}) в каждой из четырех квантовых точек $(k=\overline{1,4})$ в задаче быстродействия.

Формы импульсов напряжения, которые необходимо приложить для осуществления операции обмена SWAP, приведены на рис. 6. Практическая реализация управления такого вида пока представляется экспертам проблемной, поэтому на следующих этапах работы планируется рассмотрение задачи оптимального управления с более жесткими ограничениями на управляющие воздействия.

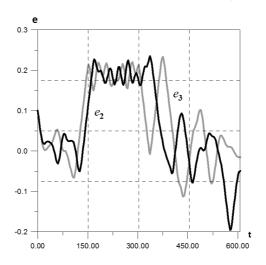


Рис. 6. Управляющие импульсы напряжения в задаче быстродействия.

4. Заключение

С помощью разработанных специализированных алгоритмов определена форма управляющего импульса напряжения и траектории вероятностей нахождения электронов со спином «вверх» и со спином «вниз» в разных КТ на фиксированных интервалах изменения времени и в задаче быстродействия. Проведенные численные эксперименты выявили, что существование туннельной связи между КТ по вертикали ведет к возникновению дополнительных ошибок при проведении операции SWAP для электронов в верхнем слое.

Результаты исследований электронных состояний модели двух вертикально совмещенных слоев туннельно-связанных полупроводниковых квантовых точек продемонстрировали принципиальную возможность использования этих состояний для реализации квантовых вычислений.

Список литературы

[1] Валиев К. А., Кокин А. А. Квантовые компьютеры. Надежды и реальность. Ижевск : Научно-издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика», 2001.-352 с. \uparrow

- [2] Двуреченский А. В., Ненашев А. В., Зиновьева А. Ф., Любин А. С., Горнов А. Ю., Зароднюк Т. С. Моделирование квантовых логических операций в наноструктурах с квантовыми точками. Иркутск : Ред.-изд. отдел ИД-СТУ СО РАН, 2010, с. 27. ↑1
- [3] Горнов А. Ю. Алгоритмы решения задач оптимального управления с терминальными ограничениями // Вычислительные технологии, 2008. 13, с. 44–50. ↑2
- [4] Горнов А. Ю. Вычислительные технологии решения задач оптимального управления. Новосибирск: Наука, 2009. 278 с. ↑3
- [5] Горнов А. Ю., Зароднюк Т. С. *Метод «криволипейного поиска» глобального экстремума в задаче оптимального управления* // Современные технологии. Системный анализ. Моделирование, 2009. **3**, с. 19−26. ↑
- [6] Gornov A.Y. Optimal Control Problem: Computing Technologies for Finding a Global Extremum. — Ulaanbaatar, Mongolia: The International Conference on Optimization, Simulation and Control, 2010, p. 75–76. ↑
- [7] Gornov A.Y., Zarodnyuk T.S. The Tunnel-Type Algorithm for Solving Non-Convex Optimal Control Problems // Journal of Global Optimization, 2011 (to appear). ↑2
- [8] Горнов А. Ю. Классификация проблем, возникающих при численном решении задач оптимального управления // Вычислительные технологии, 2008. 13, с. 17–26. ↑2
- A. Y. Gornov, A. V. Dvurechenskii, T. S. Zarodnyuk, A. F. Zinovieva, A. V. Nenashev. The numerical technique of optimization of two-dimensional controlled voltage impulse in the quantum dots system.

ABSTRACT. The optimization problem of controlled voltage impulse in form of two time functions is considered for carry out swap operation. This operation is an interchange of spin information in system of two vertically concatenating levels of tunnel-coupled semiconducting quantum dots. An equivalent optimal control problem with terminal constraints and minimum time functional is formulated and solved.

 $Key\ Words\ and\ Phrases:$ optimal control problem, numerical methods, quantum dot.

Образец ссылки на статью:

А. Ю. Горнов, А. В. Двуреченский, Т. С. Зароднюк, А. Ф. Зиновьева, А. В. Ненашев. Вычислительная технология оптимизации двумерного управляющего импульса напряжения в системе квантовых точек // Программные системы: теория и приложения: электрон. научн. журн. 2011. № 1(5), с. 27–38. URL: http://psta.psiras.ru/read/psta2011_1_27-38.pdf