ISSN 2079-3316 ПРОГРАММНЫЕ СИСТЕМЫ: ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ №2(25), 2015, с. 119–127

УДК 517.977

В. И. Гурман

О процессах управления в системах взаимодействующих спинов

Аннотация. Модель управляемой квантовой системы взаимодействующих спинов на основе уравнения Шредингера, содержащего линейное неограниченное управление, преобразуется по известной из теории вырожденных задач схеме к производной системе, эквивалентной исходной, но регулярной и симметричной, что открывает новые возможности исследования для различных частных случаев.

Рассматривается характерный случай, когда управляющее воздействие распространяется на все спины равномерно. В этом случае производная система становится обычным уравнением Шредингера с импульсным управлением лишь на границах временного отрезка. Предлагается эффективный алгоритм оптимизации управления.

Ключевые слова и фразы: квантовая система, спиновая цепочка, уравнение Шредингера, оптимальное управление, вырожденная задача, производная система, импульсное управление, магистральное решение, глобальный метод улучшения.

Введение

Рассматриваются процессы в системе взаимодействующих спинов, описываемой уравнением Шредингера с гамильтонианом, содержащим линейное неограниченное управление. Задачи их оптимизации исследовались непосредственно с помощью итерационного метода В. Ф. Кротова глобального улучшения в [1–6].

В [7–10] на примерах коротких спиновых цепочек показана высокая эффективность априорного преобразования задач с линейным управлением к производным задачам меньшего порядка, известного из теории вырожденных задач, благодаря возможности его выполнения в общей аналитической форме. В частности, при предположении о неограниченности линейного управления, таким путем получено

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 15-01-01915 А).

полное аналитическое решение для двух спинов и такое же для известной задачи управления на модели Ландау–Зинера [11]. В общем случае получается регулярная для метода глобального улучшения производная задача, что позволило получить этим методом решения для 3–5 спинов за небольшое число итераций.

В [8–10] постановка задачи и последующее преобразование к производной системе выполнялись в комплексных переменных, в которых традиционно записывается уравнение Шредингера, что делает исследование компактным и наглядным и открывает новые возможности исследования для различных частных случаев.

В данной статье рассматривается характерный случай, когда управляющее воздействие распространяется на все спины равномерно. В этом случае производная система переходит в обычное уравнение Шредингера с импульсным управлением лишь на границах временного отрезка. Предлагается эффективный алгоритм оптимизации управления для этого случая, не прибегая напрямую к трудоемким итерационным процедурам улучшения процессов.

1. Модель управляемой системы и постановка задачи оптимизации

Рассматривается N-спиновая система, описываемая уравнением Шредингера с управляемым гамильтонианом:

$$\dot{z} = -iH(u,v)z, \quad t \in [t_I, t_F], \quad H = H_0 + \mathrm{diag}\{h_j(v)\}u, \tag{1}$$

где $z = (z^1, \ldots, z^N)$, z^j — комплексная переменная состояния j-го спина как линейного осциллятора, H_0 — постоянная действительная симметричная матрица взаимодействия спинов, $u \in \mathbb{R}$, $v \in \mathbf{V} \subset \mathbb{R}^p$ — управления, $h_j(v)$ — действительные непрерывные функции. Система (1) имеет динамический инвариант

$$S = \sum_{j=1}^{N} |z^j(t_I)|^2 = \sum_{j=1}^{N} |z^j(t)|^2.$$

Ставится следующая задача оптимального управления:

$$z(t_I) = z_I, \quad J = F\left(z(t_F)\right) \to \inf, \tag{2}$$

где $F\left(z(t_F)\right)$ — непрерывная функции конечного состояния $z(t)$ — предполагаются кусочно дифференцируемыми, $u(t)$ и $v(t)$ — кусочно непрерывными. Например, это может быть задача о переводе рассматриваемой квантовой системы из заданного начального состояния z_I

на заданном отрезке времени в конечное состояние с наименьшим отклонением (по норме) от заданного состояния z_*. В семействе решений таких задач при различных t_F содержится решение задачи наискорейшего перевода системы из z_I в z_*, представляющее большой практический интерес.

2. Преобразование к производной системе и поиск оптимального решения

Множество скоростей системы (1) при фиксированных переменных состояния представляет собой пучок прямых, проходящих через некоторую точку. В соответствии с теорией **[12, 13]** исходную систему (1) можно заменить эквивалентной *ослабленной системой*, множеством скоростей которой служит выпуклая оболочка исходного множества скоростей (в данном случае — аффинная оболочка). Для этого достаточно овыпуклить годограф $(h(v)z)u$ при фиксированных z и $|u| = 1$ и далее расширить полученную сферу до несущей гиперплоскости в пространстве скоростей $(\dot{z})$ при $|u| \to \infty$.

Рассмотрим предельную систему, соответствующую исходной:

$$\frac{dz}{d\tau} = -i(h(v)z)u, \quad h(v) = \operatorname{diag}\{h_j(v)\} \tag{3}$$

(которая по смыслу описывает асимптотически поведение исходной системы (1) при больших скоростях). Для ослабленной системы она может быть записана в форме дифференциального включения:

$$\frac{dz}{d\tau} \in -i \operatorname{Lin}\,(h(\mathbf{V})zu). \tag{4}$$

Пусть $h(v_k)zu$ — набор векторов, содержащий базис линейной оболочки. Очевидно, любой вектор $h(v)zu$ выражается как линейная комбинация:

$$h(v)zu = \sum_k h(v_k)zu_k.$$

Тогда общий интеграл предельной системы системы (3) или (4), описывающий интегральное многообразие, может быть найден последовательным интегрированием уравнений

$$\frac{dz}{d\tau_k} = -i \operatorname{diag}\Big\{h_j(v_k)\Big\}zu_k,$$

которое в данном случае линейной системы с постоянными коэффициентами выполняется аналитически и приводит к следующему выражению общего решения:

$$z = \operatorname{diag}\left\{e^{-i\sum\limits_k h_j(v_k)\tau_k}\right\}w. \tag{5}$$

Его обращение задает искомый интеграл как функцию фазовых переменных, сохраняющую постоянное значение на любых траекториях системы (3) или (4):

$$w = \operatorname{diag}\left\{e^{i\sum\limits_k h_j(v_k)\tau_k}\right\}z. \tag{6}$$

Взяв полную производную по времени dw/dt от (6) в силу исходной системы (1) и полагая $\dot{\tau}_k = u_k$, будем иметь:

$$\dot{w} = -i\operatorname{diag}\left\{e^{i\sum\limits_k (h_j(v_k)\tau_k)}\right\}H_0\operatorname{diag}\left\{e^{-i\sum\limits_k (h_j(v_k)\tau_k)}\right\}w. \tag{7}$$

Производную систему составляют совместно уравнение (7) (дифференциальная связь) и выражение (6) (связь между исходными и «производными» переменными z и w). Как известно из [**13**], производная система при неограниченном линейном управлении эквивалентна исходной и описывает регулярным образом как обычные, так и обобщенные решения исходной системы — импульсные режимы. В данном случае ее можно трактовать как другую модель рассматриваемой квантовой системы, регулярную и более «изящную» по сравнению с исходной, что открывает новые возможности исследования для различных частных случаев.

Разумеется, полученное решение производной системы относится к идеализированной модели (1) при предположении о неограниченности линейного управления. Однако оно может быть аппроксимировано допустимым решением при практических ограничениях [**14**] с целью использования в качестве эффективного начального приближения в итерационной процедуре, например, по методу Кротова глобального улучшения [**3**, **4**], весьма популярного среди физиков (см. обзор в [**5**]).

При этом существенную роль будет играть магистральный характер решения, выявленный при переходе к производной задаче и сохраняющийся при аппроксимации. Применение дискретно-непрерывной модификации метода глобального улучшения [**8**] позволяет организовать регулярное улучшение как непрерывной магистрали, так и участков аппроксимации разрывов, как правило, примыкающих к границам временного интервала.

3. Случай равномерного управляющего воздействия

Рассмотрим характерный случай, когда управляющее воздействие распространяется на все спины равномерно, что выражается равенством коэффициентов при линейном управлении $h_j(v): \ h_1(v) = h_2(v) = \cdots = h_N(v) = h(v)$. В этом случае «окаймляющие» диагональные матрицы могут быть представлены в виде

$$e^{i\sum\limits_k (h(v_k)\tau_k)}E, \quad e^{-i\sum\limits_k (h(v_k)\tau_k)}E,$$

где E — единичая матрица (которая перестановочна с любой другой). При этом (7) и (6) переходят в

$$\dot{w} = -iH_0 w, \quad w_{I,F} = e^{i\sum\limits_k h(v_k)\tau_{kI,F}} z_{I,F}. \tag{8}$$

Как видно, дифференциальная связь этой системы представляет собой обычное уравнение Шредингера с гамильтонианом H_0 — векторное линейное однородное уравнение с постоянными коэффициентами, не зависящее от новых управлений (τ_k). От этих управлений зависят только граничные значения при $t_{I,F}$.

Граничные значения $w(t)$ связаны между собой переходной матрицей Q $(w_F = Qw_I)$, которая находится известными методами.

Минимизируемый функционал в терминах производной системы с учетом указанных соотношений выражается следующим образом:

$$\begin{aligned} J = F(z(t_F)) = F\Big(\Big(e^{-i\sum\limits_k h_j(v_k)\tau_k}\Big)_F Q\Big(\Big(e^{i\sum\limits_k h_j(v_k)\tau_k}\Big)_I z_I\Big)\Big) = \\ = F\Big(e^{-i\sum\limits_k h_j(v_k)(\tau_{k_F} - \tau_{k_I})} Q z_I\Big), \end{aligned} \tag{9}$$

где z_I — заданное начальное состояние исходной системы (1). Это выражение представляет собой некоторую функцию $\Phi(\{\delta_k\})$, где $\delta_k = \tau_{k_F} - \tau_{k_I}$. Таким образом, задача окончательно сводится к минимизации по переменным δ_k функции $\Phi(\{\delta_k\})$. Число K переменных определяется зависимостью $h(v)$, отражающей физические возможности организации управляющих воздействий, и в известных на сегодня примерах оно практически невелико (в [8–10] рассматривались случаи $K = 1, 3$, а теоретически $K \leq N$), поэтому такая задача неизмеримо проще задач итерационной оптимизации на исходной модели. Этот алгоритм, благодаря его простоте, может быть использован для получения начальных приближений в более общей модели с управляемой дифференциальной связью.

4. Заключение

Таким образом, для задач управления квантовыми системами достаточно общего класса на основе уравнения Шредингера (1) с гамильтонианом, содержащим линейное управление. Предложено явное преобразование исходной системы к эквивалентной дискретно-непрерывной производной системе (7),(6), описывающей регулярно обобщенные решения импульсного типа. Фактически она может рассматриваться как новая модель при сильных управляющих воздействиях, «изящная» и удобная для исследования разнообразных задач управления.

В случае, когда управляющее воздействие распространяется на все спины равномерно, решение производной системы представляет собой комбинацию импульсных воздействий на концах заданного отрезка и неуправляемый процесс (решение исходного уравнения Шредингера при нулевом управлении) внутри отрезка. Для этого случая предложен простой эффективный алгоритм оптимизации, который может быть использован для получения начальных приближений в более общей модели с управляемой дифференциальной связью.

Автор выражает благодарность д.ф.м.-н. И.В. Расиной за ценные замечания, высказанные при обсуждении вариантов рукописи этой статьи, существенно повлиявших на ее содержание.

Список литературы

[1] В. Ф. Кротов. «Об оптимизации управления квантовыми системами», *Докл. РАН*, **423**:3 (2008), с. 316–319 ↑ 119.

[2] В. Ф. Кротов. «Управление квантовыми системами и некоторые идеи теории оптимального управления», *Автоматика и телемеханика*, 2009, №3, с. 15–23 ↑ 119.

[3] В. Ф. Кротов, А. В. Булатов, О. В. Батурина. «Оптимизация линейных систем с управляемыми коэффициентами», *Автоматика и телемеханика*, 2011, №6, с. 64–78 ↑ 119, 122.

[4] О. В. Батурина, О. В. Моржин. «Оптимальное управление системой спинов на основе метода глобального улучшения», *Автоматика и телемеханика*, 2011, №6, с. 79–86 ↑ 119, 122.

[5] M. Murphy, S. Montangero, V. Giovannetti, T. Calarco. "Communication at the quantum speed limit along a spin chain", *Phys. Rev. A*, **82** (2010), pp. 022318, URL http://arxiv.org/abs/1004.3445v1 ↑ 119, 122.

[6] Е. А. Трушкова. «Об одном классе задач управления для квантовых систем», *Автоматика и телемеханика*, 2013, №1, с. 35–46 ↑ 119.

[7] В. И. Гурман. «Магистральные решения в задачах оптимального управления квантомеханическими системами», *Автоматика и телемеханика*, 2011, №6, с. 115–126 ↑ 119.

[8] V. I. Gurman, I. V. Rasina, O. V. Baturina. “Optimization of excitation transfer in a spin chain”, *Periodic Control Systems*, **5**:1 (2013), pp. 177–180 ↑ 119, 120, 122, 123.

[9] В. И. Гурман, И. В. Расина, О. В. Фесько. «О практических преобразованиях вырожденных задач оптимального управления», *Программные системы: теория и приложения*, **4**:2(16) (2013), с. 71–82, URL http://psta.psiras.ru/read/psta2013_2_71-82.pdf ↑ 119, 120, 123.

[10] В. И. Гурман, И. С. Гусева, О. В. Фесько. «Магистральные решения в задаче управления квантовой системой», *Программные системы: теория и приложения*, **4**:4(18) (2013), с. 91–106, URL http://psta.psiras.ru/read/psta2013_4_91-106.pdf ↑ 119, 120, 123.

[11] В. И. Гурман, И. В. Расина. «Оптимизация процессов в спиновой цепочке», *Автоматика и телемеханика*, 2014, №12, с. 153–159 ↑ 120.

[12] В. И. Гурман. *Вырожденные задачи оптимального управления*, Наука, М., 1997, 304 с. ↑ 121.

[13] В. И. Гурман. *Принцип расширения в задачах управления*, Наука. Физматлит, М., 1997, 288 с. ↑ 121, 122.

[14] В. И. Гурман. «Магистральные решения в процедурах поиска оптимальных управлений», *Автоматика и телемеханика*, 2003, №3, с. 61–71 ↑ 122.

Рекомендовал к публикации *д.т.н., проф. А. М. Цирлин*

Об авторе:

Владимир Иосифович Гурман

Д.т.н., профессор, г.н.с. ИЦСА Института программных систем им. А.К. Айламазяна РАН

e-mail: vig70@mail.ru

Пример ссылки на эту публикацию:

В. И. Гурман. «О процессах управления в системах взаимодействующих спинов», *Программные системы: теория и приложения*, 2015, **6**:2(25), с. 119–127. URL http://psta.psiras.ru/read/psta2015_2_119-127.pdf

Vladimir Gurman. *On Control Processes in the Systems of Counteracting Spins.*

Abstract. The model of quantum system of interacting spins based on Shrödinger equation with linear control is transformed to the derived system (known from the degenerate problems theory), equivalent to the original one, but regular and simmetric opens new perspectives of investigaton for different particular cases.

It is considered a typical case when control action is distributed uniformly to all spins. In this case the derived system proved to be same Shrödinger equation without control and regular description of impulse control modes at the boundaries of time interval. An effective algorithm of control optimization is proposed.

Key Words and Phrases: quantum system, spin chain, Shrödinger equation, optimal control, derived system, degenerate problem, impulse control, turnpike solution, global improvement method.

References

[1] V. F. Krotov. “Optimization of the control of quantum systems”, *Dokl. RAN*, **423**:3 (2008), pp. 316–319 (in Russian).

[2] V. F. Krotov. “Control of the quantum systems and some ideas of the optimal control theory”, *Autom. Remote Control*, **70**:3 (2009), pp. 357–365.

[3] V. F. Krotov, A. V. Bulatov, O. V. Baturina. “Optimization of linear systems with controllable coefficients”, *Autom. Remote Control*, **72**:6 (2011), pp. 1199–1212.

[4] O. V. Baturina, O. V. Morzhin. “Optimal control of the spin system on a basis of the global improvement method”, *Autom. Remote Control*, **72**:6 (2011), pp. 1213–1220.

[5] M. Murphy, S. Montangero, V. Giovannetti, T. Calarco. “Communication at the quantum speed limit along a spin chain”, *Phys. Rev. A*, **82** (2010), pp. 022318, URL http://arxiv.org/abs/1004.3445v1.

[6] E. A. Trushkova. “On one class of optimal control problems for quantum systems”, *Autom. Remote Control*, **74**:1 (2013), pp. 26–35.

[7] V. I. Gurman. “Turnpike solutions in optimal control problems for quantum-mechanical systems”, *Autom. Remote Control*, **72**:6 (2011), pp. 1248–1257.

[8] V. I. Gurman, I. V. Rasina, O. V. Baturina. “Optimization of excitation transfer in a spin chain”, *Periodic Control Systems*, **5**:1 (2013), pp. 177–180.

[9] V. I. Gurman, I. V. Rasina, O. V. Fes’ko. “Practical transformation of degenerate optimal control problems”, *Programmnye Sistemy: Teoriya i Prilozheniya*, **4**:2(16) (2013), pp. 71–82 (in Russian), URL http://psta.psiras.ru/read/psta2013_2_71-82.pdf.

[10] V. I. Gurman, I. S. Guseva, O. V. Fes’ko. “The turnpike solutions in the quantum systems control problem”, *Programmnye Sistemy: Teoriya i Prilozheniya*, **4**:4(18) (2013), pp. 91–106 (in Russian), URL http://psta.psiras.ru/read/psta2013_4_91-106.pdf.

[11] V. I. Gurman, I. V. Rasina. “Optimization of processes in a spin chain”, *Autom. Remote Control*, **75**:12 (2014), pp. 2212–2216.

[12] V. I. Gurman. *Singular optimal control problem*, Nauka, M., 1997 (in Russian), 304 p.

[13] V. I. Gurman. *The principle of enlargement in control*, Nauka. Fizmatlit, M., 1997 (in Russian), 288 p.

[14] V. I. Gurman. "Turnpike solutions in the procedures seeking optimal controls", *Autom. Remote Control*, **64**:3 (2003), pp. 399–408.

Sample citation of this publication:

Vladimir Gurman. " On Control Processes in the Systems of Counteracting Spins", *Program systems: theory and applications*, 2015, **6**:2(25), pp. 119–127. (*In Russian.*) URL http://psta.psiras.ru/read/psta2015_2_119-127.pdf