

О. В. Батурина, О. В. Моржин

Оптимизация управления квантовой системой на модели Ландау–Зинера

Аннотация. Статья посвящена вычислительным экспериментам по применению метода глобального (нелокального) улучшения В.Ф. Кротова к исследованию одной задачи оптимального управления квантовой системой, описываемой уравнением Шредингера с гамильтонианом в форме Ландау–Зинера.

Ключевые слова и фразы: квантовые системы, глобальные улучшения.

Введение

В работах [1, 2] для класса общих нелинейных задач оптимального управления дифференциальными системами со свободным правым концом траектории предложен метод глобального улучшения в рамках теории достаточных условий оптимальности [3]. В методе не осуществляется варьирование относительно улучшаемого управления с параметрической оптимизацией, в отличие, например, от методов условного градиента, игольчатого варьирования [4].

Решение задач управления квантовыми системами [5] в контексте современных исследований по нанотехнологиям, квантовым компьютерам [6] представляет актуальную, перспективную тематику. Публикация в [2, 7] результатов моделирования оптимального управления молекулярным состоянием вещества с применением глобального метода вызвала интерес физиков [8] к данному методу.

Цель данной статьи — исследование вопросов применения метода глобального улучшения [2, 9–12] для проблемы оптимального управления спинами [8] на примере случая гамильтониана в форме Ландау–Зинера [8], причем реализация метода улучшения проводится с линейной по фазовой переменной разрешающей функцией (Кротова), следуя теоретическому аппарату, изложенному в статьях [9–11].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 10-01-90718-моб_ст).

1. Постановка задачи

Рассматривается квантовая система [8, 9]

$$(1) \quad i\hbar\dot{\psi}(t) = \hat{H}[u(t)]\psi(t), \quad \psi(0) = \xi,$$

где $\hbar$ — постоянная Планка, $\hat{H}[u(t)]$ — гамильтониан, $t \in [0, T]$. Функция $u(t)$, $t \in [0, T]$, кусочно-непрерывная, характеризует воздействие внешним полем. В рамках статьи функция u действительная и скалярная. Состояния квантовой системы изучаются на комплексной сфере единичного радиуса [5].

Вводится целевой критерий с вещественнозначным функционалом:

$$(2) \quad I(\psi, u) = 1 - |\langle \psi_G, \psi(T) \rangle|^2 = \\ 1 - \langle \psi(T), \psi_G \rangle \langle \psi_G, \psi(T) \rangle \rightarrow \inf, \quad |\psi_G|^2 = 1,$$

где ψ_G — заданный вектор, $|\cdot|^2$ — модуль комплексного числа.

Будем исследовать случай $n = 2$. Рассматривается гамильтониан в форме Ландау–Зинера, использованный также в работе [8]: $H = \begin{pmatrix} u & \omega \\ \omega & -u \end{pmatrix}$. Система (1) в покомпонентной форме:

$$(3) \quad i\hbar\dot{\psi}_1 = u\psi_1 + \omega\psi_2, \quad i\hbar\dot{\psi}_2 = \omega\psi_1 - u\psi_2, \\ \psi_1(0) = \xi_1, \quad \psi_2(0) = \xi_2.$$

Целевой критерий (2) в двумерном случае:

$$(4) \quad I(\psi, u) = 1 - |\overline{(\psi_G)_1}\psi_1(T) + \overline{(\psi_G)_2}\psi_2(T)|^2 \rightarrow \inf.$$

Представляет интерес изучение вычислительных аспектов реализации глобального метода улучшения на примере задачи (3), (4).

2. Конструкции метода глобального улучшения

В [9, 10] конструкции глобального метода записаны в терминах комплексных переменных для класса задач оптимального управления квантовыми системами. В контексте работы [11] применительно к изучаемому случаю $n = 2$ удобно перейти к задаче в терминах действительных переменных. Производится замена $\psi_1 = z_1 + iz_3$, $\psi_2 = z_2 + iz_4$.

Система (3) представляется в виде

$$(5) \quad \begin{aligned} \dot{z}_1 &= \frac{1}{\hbar} (uz_3 + \omega z_4), \quad \dot{z}_2 = \frac{1}{\hbar} (\omega z_3 - uz_4), \\ \dot{z}_3 &= \frac{1}{\hbar} (-uz_1 - \omega z_2), \quad \dot{z}_4 = \frac{1}{\hbar} (-\omega z_1 + uz_2), \\ z(0) &= z_S = (\operatorname{Re} \psi_1(0), \operatorname{Re} \psi_2(0), \operatorname{Im} \psi_1(0), \operatorname{Im} \psi_2(0))^T. \end{aligned}$$

Полагаем в (4) $\psi_G = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$, где a_1, b_1, a_2, b_2 — действительные числа, удовлетворяющие условию $a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2 = 1$. Критерий принимает следующий вид:

$$(6) \quad \begin{aligned} I(z, u) &= 1 - [(a_1^2 + b_1^2)z_1^2(T) + 2(a_1a_2 + b_1b_2)z_1(T)z_2(T) + \\ &+ 2(a_1b_2 - b_1a_2)z_1(T)z_4(T) + (a_2^2 + b_2^2)z_2^2(T) + \\ &+ 2(a_2b_1 - b_2a_1)z_2(T)z_3(T) + (b_1^2 + a_1^2)z_3^2(T) + \\ &+ 2(b_1b_2 + a_1a_2)z_3(T)z_4(T) + (b_2^2 + a_2^2)z_4^2(T)] = \\ &= 1 - \langle z(t_F), Lz(T) \rangle \rightarrow \inf, \end{aligned}$$

где матрица коэффициентов

$$L = \begin{pmatrix} (a_1^2 + b_1^2) & (a_1a_2 + b_1b_2) & 0 & (a_1b_2 - b_1a_2) \\ (a_1a_2 + b_1b_2) & (a_2^2 + b_2^2) & (a_2b_1 - b_2a_1) & 0 \\ 0 & (a_2b_1 - b_2a_1) & (b_1^2 + a_1^2) & (b_1b_2 + a_1a_2) \\ (a_1b_2 - b_1a_2) & 0 & (b_1b_2 + a_1a_2) & (b_2^2 + a_2^2) \end{pmatrix}.$$

Функция Понтрягина для (5), (6):

$$\begin{aligned} H(p, z, u) &= \frac{1}{\hbar} [p_1(uz_3 + \omega z_4) + p_2(\omega z_3 - uz_4) + \\ &+ p_3(-uz_1 - \omega z_2) + p_4(-\omega z_1 + uz_3)]. \end{aligned}$$

Сопряженная система

$$(7) \quad \begin{aligned} \dot{p}_1 &= \frac{1}{\hbar} (up_3 + \omega p_4), \quad \dot{p}_2 = \frac{1}{\hbar} (\omega p_3 - up_4), \\ \dot{p}_3 &= -\frac{1}{\hbar} (up_1 + \omega p_2), \quad \dot{p}_4 = \frac{1}{\hbar} (up_2 - \omega p_1), \\ p_1(T) &= 2(a_1^2 + b_1^2)z_1(T) + 2(a_1a_2 + b_1b_2)z_2(T) + 2(a_1b_2 - b_1a_2)z_4(T), \\ p_2(T) &= 2(a_1a_2 + b_1b_2)z_1(T) + 2(a_2^2 + b_2^2)z_2(T) + 2(a_2b_1 - b_2a_1)z_3(T), \\ p_3(T) &= 2(a_2b_1 - b_2a_1)z_2(T) + 2(b_1^2 + a_1^2)z_3(T) + 2(b_1b_2 + a_1a_2)z_4(T), \\ p_4(T) &= 2(a_1b_2 - b_1a_2)z_1(T) + 2(b_1b_2 + a_1a_2)z_3(T) + 2(b_2^2 + a_2^2)z_4(T). \end{aligned}$$

Для линейной по u задачи (5), (6) условно вводится ограничение

$$(8) \quad u(t) \in [-\nu, \nu], \quad t \in [0, T], \quad \nu > 0,$$

в плане построения зависимости $\tilde{u}(t, z) = \nu \operatorname{sign} \mathcal{K}(p(t), z)$, $t \in [0, T]$, где функция переключения $\mathcal{K}(p(t), z) = H_u(p(t), z, u)$.

Отображение $\tilde{u}(t, z)$, как известно, записывается в форме

$$(9) \quad \tilde{u}(t, z) = \begin{cases} -\nu, & \mathcal{K}(p(t), z) < 0, \\ \text{любое из } [-\nu, \nu], & \mathcal{K}(p(t), z) = 0, \\ \nu, & \mathcal{K}(p(t), z) > 0. \end{cases}$$

В случае $\mathcal{K}(p(t), z) = 0$ можно полагать $\tilde{u}$ равным $-\nu$ или ν ; при этом частые переключения управления с $-\nu$ на ν на особом режиме могут означать практическую нереализуемость расчетного управления. Поэтому вместо реализации таких переключений будем использовать специальную формулу для управления, предложенную в статьях [10, 11].

С вычислительной точки зрения равенство нулю понимается в смысле принадлежности некоторой достаточно малой ε -окрестности нуля.

Алгоритм. На k -й итерации глобального метода для улучшения управления $u^{(k)}(t)$, $t \in [0, T]$, $k \geq 0$, в задаче (5), (6), (8) выполняются следующие шаги:

1) интегрирование системы (5) при управлении $u^{(k)}$ для расчета траектории $z^{(k)}$;

2) вычисление решения $p^{(k)}$ сопряженной системы (7) на процессе $(z^{(k)}, u^{(k)})$;

3) интегрирование системы (5) с отображением $\tilde{u}^{(k)}(t, z)$, $t \in [0, T]$, в плане расчета траектории $z^{(k+1)}$;

4) построение нового приближения $u^{(k+1)}(t) = \tilde{u}^{(k)}(t, z^{(k+1)}(t))$, $t \in [0, T]$.

В алгоритме изучается поведение знака производной функции переключения, следуя формулам из статьи [11].

Линейность задачи по u является положительным моментом для разрешения операции максимизации функции Понтрягина. С другой стороны, интегрирование системы (5) с зависимостью (9) имеет известные особенности [11]. В этой связи на практике известен подход

с регуляризацией целевого функционала, следуя А.Н. Тихонову [13]. Вводится в рассмотрение вспомогательный целевой критерий

$$(10) \quad J^\beta(z, u) = I(z, u) + \beta \int_0^T u^2(t) dt \rightarrow \inf, \quad \beta > 0.$$

Функция Понтрягина $H^\beta(t, p, z, u) = H(t, p, z, u) - \beta u^2$. Дифференцируя эту функцию по u и рассматривая $p^{(k)}(t)$, приходим к зависимости

$$(11) \quad u^\beta(t, z) = \frac{1}{2\beta} \mathcal{K}(t, p^{(k)}(t), z), \quad t \in [0, T], \quad \beta > 0.$$

Глобальный метод применительно к вспомогательной задаче (10), (5), (6) не требует учета условно введенного ограничения (8). В отличие от стандартного глобального алгоритма, необходим подбор достаточно малого значения $\beta > 0$ в данной модификации. Вопросы реализации подхода, основанного на (10), (11), относительно билинейных систем в рамках глобального метода изучались также в работе [12].

3. Вычислительные эксперименты

Проведена программная реализация глобального метода (на языках Matlab, Fortran). Расчеты проведены для различных условных значений ψ_G , ξ . Представим сравнительные результаты расчетов с условным набором

$$\begin{aligned} z_S &= (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0, 0)^T, \\ a_1 &= 0.6, \quad b_1 = -0.3, \quad a_2 = 0.1, \quad b_2 = \sqrt{0.54}, \\ \omega &= \hbar = 1, \quad T = 1.5. \end{aligned}$$

Приближение $u^{(0)}(t)$, $t \in [0, T]$, представляет собой решение краевой задачи [8]

$$\begin{aligned} \dot{u}^{(0)}(t) &= 4\gamma(\omega^2 + u^2(t)), \\ \gamma &= \frac{1}{4T\omega} \left[\operatorname{arctg} \left(\frac{u^{(0)}(T)}{\omega} \right) - \operatorname{arctg} \left(\frac{u^{(0)}(0)}{\omega} \right) \right] = \\ &= -\frac{1}{2T\omega} \operatorname{arctg} \left(\frac{u^{(0)}(0)}{\omega} \right), \quad u^{(0)}(0) = -u^{(0)}(T). \end{aligned}$$

Формирование начального приближения таким образом исходит из адиабатического приближения в квантовой механике [5]. Общее решение $\arctg\left(\frac{u^{(0)}(t)}{\omega}\right) = 4\gamma\omega t + C$, частное решение

$$(12) \quad u^{(0)}(t) = \omega \operatorname{tg}(2\gamma\omega(2t - T)), \quad t \in [0, T].$$

Функция $u^{(0)}(t)$, $t \in [0, T]$, формируется численно по формуле (12) в компьютерной программе.

Полагаем $\varepsilon = 0.001$. Интегрирование систем методом Рунге–Кутты 4-го порядка.

1. Глобальный метод с применением формулы для управления при особом режиме [11]. Считаем $u^{(0)}(0) = -30$ в формуле (12) для γ . Задаем $\nu = 30$ в условии (8).

На начальном приближении $u^{(0)}(t)$ имеем значение $I^{(0)} = 0.7681$. В таблице 1 приведены результаты последовательных улучшений по первым итерациям (ГлМ — глобальный метод, ГрМ — градиентный метод). Рис. 1 иллюстрирует высокую сравнительную эффективность глобального метода. В отличие от градиентного метода, глобальный метод не зависит от алгоритмического параметра. Глобальный метод обеспечивает быструю релаксацию: на 9-й итерации получено значение $I = 0.000952$, что составляет 0.124 % от $I^{(0)}$. Сравнение графиков управлений $u^{(1)}$, $u^{(9)}$, полученных за первую итерацию и в результате серии итераций соответственно, показывает, что участок $[0, t_1)$, на котором управление принимает значение $-\nu$, важен в плане реализации выхода на особый режим.

Таблица 1.

Номер k	$I(z^{(k)}, u^{(k)})$ по ГлМ	$I(z^{(k)}, u^{(k)})$ по ГрМ
0	0.7681	0.7681
1	0.1401	0.6911
2	0.0040	0.6107
3	0.0021	0.5421
4	0.0015	0.4913

На рис. 2 приведены графики управлений $u^{(0)}(t)$ и $u^{(9)}(t)$. В точке $t_1 = 0.0667$ происходит переключение с граничного управления $u^{(9)}(t) = -30$ на внутреннее $u^{(9)}(t) = \tilde{u}^{(9)}(t)$, где функция $\tilde{u}^{(9)}(t)$

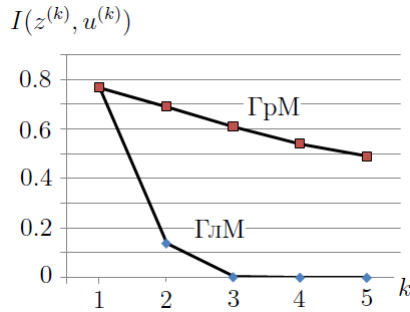


Рис. 1.

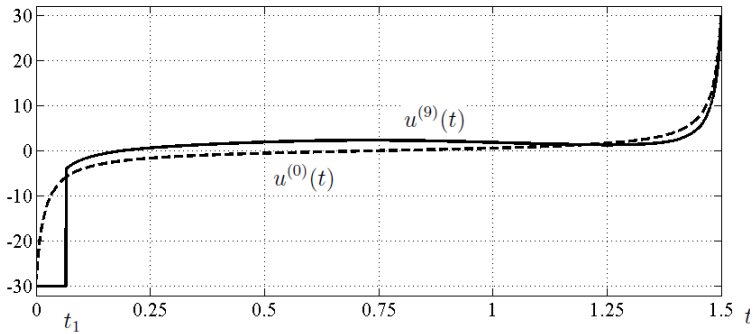


Рис. 2.

определяется согласно теории [11]. Участку $[0, t_1)$ соответствуют достаточно большие по модулю отрицательные значения функции переключения $k^{(9)}(t) = \mathcal{K}(p^{(8)}(t), z^{(9)}(t))$.

На рис. 3 показаны графики функций $z_j^{(9)}(t)$, $j = \overline{1, 4}$, соответствующих управлению $u^{(9)}(t)$. Графики иллюстрируют достаточно быстрое изменение траектории на участке $[0, t_1)$, где применяется управление, равное $-\nu$. Это необходимо для выхода на особый режим при заданном начальном состоянии.

Сравнительные эксперименты с привлечением градиентного метода [10] показывают, что глобальный метод надежнее, так как, во-первых, учитывает специфику особого оптимального управления и,

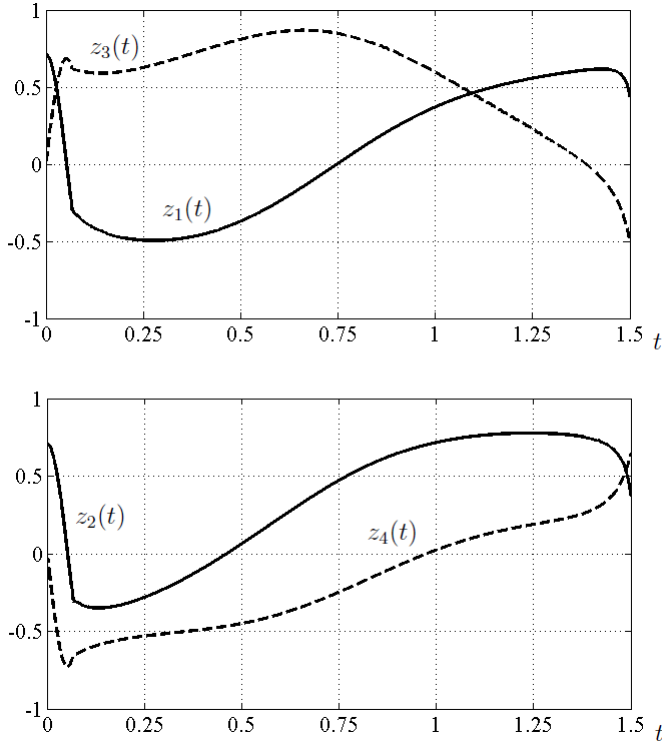


Рис. 3.

во-вторых, не требует настройки алгоритмического параметра (в нерегуляризованной, исходной формулировке).

2. Глобальный метод с регуляризацией по управлению.

Полагаем значение $u^{(0)}(0) = -30$ в формуле для γ в (12). Рассматриваемая модификация глобального метода не требует условного ограничения (8); тем не менее, в контексте с изложенными выше результатами расчетов полагаем $\nu = 30$ в ограничении (8).

Рассматриваем сначала $\beta = 0.0055$. В таблице 2 показаны последовательные улучшения по итерациям, а на рис. 4 — график управления $u^{(9)}(t)$.

Регуляризация требует настройки параметра, причем проигрывает стандартному глобальному методу и по шагам уменьшения функционала I , что обусловлено влиянием добавочного слагаемого в функционале I^β . Положительной чертой модификации является непрерывность функции $\tilde{u}^{(k)}(t, z)$ по z .

Далее, рассматриваем меньшее значение $\beta = 0.002$. В таблице 3 показаны последовательные улучшения по итерациям. Рис. 5 иллюстрирует учет ограничения (8) при данном значении β .

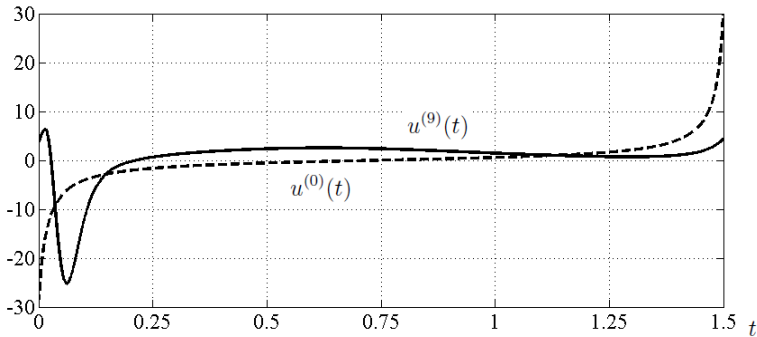


Рис. 4.

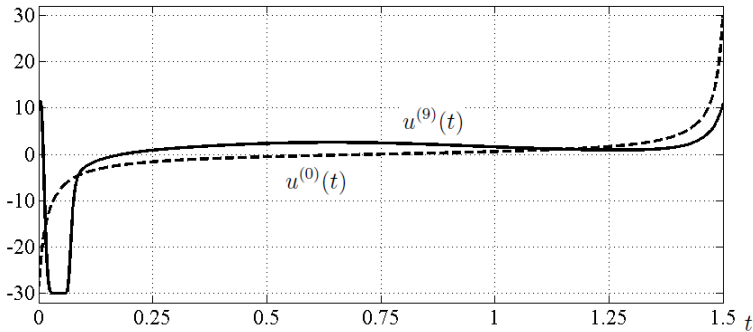


Рис. 5.

Рис. 4,5 показывают наличие участка управления с достаточно быстрым изменением в некоторой полукрестности $[0, t_1)$, что обусловлено учетом начального условия $z(0) = z_S$.

Таблица 2.

Номер k	Значение $I(z^{(k)}, u^{(k)})$	Номер k	Значение $I(z^{(k)}, u^{(k)})$
0	0.7681	5	0.0027
1	0.0614	6	0.0017
2	0.0242	7	0.0014
3	0.0119	8	0.0013
4	0.0057	9	0.0012

Таблица 3.

Номер k	Значение $I(z^{(k)}, u^{(k)})$	Номер k	Значение $I(z^{(k)}, u^{(k)})$
0	0.7681	5	0.0027
1	0.0876	6	0.0019
2	0.0122	7	0.0015
3	0.0068	8	0.0013
4	0.0042	9	0.0012

Заключение

В статье для задачи оптимального управления квантовой системой на модели Ландау–Зинера проведены реализации стандартного метода глобального улучшения [2, 11], а также модификации с регуляризацией функционала по управлению. Основным результатом статьи является демонстрация высокой эффективности глобального метода применительно к модели, характерной для проблем оптимального управления системами спинов, описываемыми уравнением Шредингера.

Представляется перспективным распространение результатов работы на задачи об управлении цепочками спинов с рассмотрением различных прикладных аспектов. В связи с большими размерностями реальных прикладных задач представляется перспективным привлечение суперкомпьютерных технологий (MPI, T++ и т.п.).

Список литературы

- [1] Кротов В.Ф., Фельдман Н.Н. *Итерационный метод решения задач оптимального управления* // Изв. АН СССР. Техн. киберн., 1983, № 2, с. 160 – 168. ↑

- [2] Krotov V.F. Global methods in optimal control theory. New York : Marcel Dekker, 1996, 408 p. ↑[1](#), [3](#)
- [3] Кротов В.Ф., Гурман В.И. Методы и задачи оптимального управления. М. : Наука, 1973, 448 с. ↑[1](#)
- [4] Васильев О.В. Лекции по методам оптимизации. Иркутск : Изд-во Иркутск. ун-та, 1994, 344 с. ↑[1](#)
- [5] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 3: Квантовая механика (нерелятивистская теория). 6-е изд. М., 2008, 700 с. ↑[1](#), [3](#)
- [6] Валиев К.А. *Квантовые компьютеры и квантовые вычисления* // Успехи физ. наук, 2005. **175**, с. 3 – 39. ↑[1](#)
- [7] Казаков В.А., Кротов В.Ф. *Оптимальное управление взаимодействием света и вещества* // Автоматика и телемеханика, 1987, № 4, с. 9 – 15. ↑[1](#)
- [8] Saneva T., Murphy M., Calarco T. *etc. Optimal control at the quantum speed limit* // Physical Review Lett., 2009. **103**. ↑[1](#), [1](#), [3](#)
- [9] Кротов В.Ф. *Об оптимизации управления квантовыми системами* // Доклады РАН, 2008. **423**, № 3, с. 316 – 319. ↑[1](#), [2](#)
- [10] Кротов В.Ф. *Управление квантовыми системами и некоторые идеи теории оптимального управления* // Автоматика и телемеханика, 2009, № 3, с. 15 – 23. ↑[2](#), [2](#), [3](#)
- [11] Батурина О.В., Булатов А.В., Кротов В.Ф. *К оптимизации линейных систем с управляемыми коэффициентами* // Автоматика и телемеханика, 2011, (в печати). ↑[1](#), [2](#), [2](#), [3](#), [3](#), [3](#)
- [12] Батурина О.В. *Билинейные динамические системы: исследование итеративных методов оптимизации* // Проблемы управления, 2010, № 5, с. 22 – 27. ↑[1](#), [2](#)
- [13] Тихонов А.Н. *О методах регуляризации задач оптимального управления* // Докл. АН СССР, 1965. **162**, № 4, с. 763 – 765. ↑[2](#)

О. V. Baturina, O. V. Morzhin. *Quantum system control optimization for the Landau-Ziner model.*

ABSTRACT. The article is devoted to computer experiments according to application of the global (nonlocal) improvement method by V.F. Krotov for investigation of an optimal control problem for quantum system with Schrodinger's equation and hamiltonian in the form of Landau-Ziner.

Key Words and Phrases: quantum systems, global improvements.

Образец ссылки на статью:

О. В. Батурина, О. В. Моржин. *Оптимизация управления квантовой системой на модели Ландау–Зинера* // Программные системы: теория и приложения : электрон. научн. журн. 2011. № 1(5), с. 51–61. URL: http://psta.psiras.ru/read/psta2011_1_51-61.pdf