

ЛАНДШАФТЫ ОПТИМИЗАЦИИ КВАНТОВЫХ ВЕНТИЛЕЙ И НАБЛЮДАЕМЫХ

А.Н. Печень, В.Н. Петруханов, О.В. Моржин, Б.О. Волков

Научная сессия МИАН,
посвященная подведению итогов 2024 г.

20 ноября 2024 г.

Управление замкнутой квантовой системой¹

Динамика замкнутой квантовой системы описывается уравнением Шредингера:

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

Здесь H_0 и V ($[H_0, V] \neq 0$) — свободный гамильтониан и гамильтониан взаимодействия (эрмитовы $N \times N$ -матрицы), $f \in L_2([0, T], \mathbb{R})$ — когерентное управление.

Типы целевых функционалов (ЦФ):

1. Среднее значение наблюдаемой $O \in \mathbb{C}^{N \times N}$ ($O = O^\dagger$). Пусть $\rho_0 \in \mathbb{C}^{N \times N}$, $\rho_0 \geq 0$, $\text{Tr} \rho_0 = 1$.

$$J_O[f] = \text{Tr}[O U_T^f \rho_0 U_T^{f\dagger}] \rightarrow \max.$$

2. Генерация квантового вентиля $W \in \text{SU}(N)$:

$$J_W[f] = \frac{1}{N^2} |\text{Tr}(W^\dagger U_T^f)|^2 \rightarrow \max.$$

¹C.P. Koch et al., Quantum optimal control in quantum technologies. Strategic report on current status, visions and goals for research in Europe, *EPJ Quantum Technol.* **9**, 19 (2022).

Ландшафт задачи квантового управления

Оптимальные управлений – это точки глобального экстремума ЦФ J .

Ловушки — это управлений, которые являются точками локального экстремума ЦФ J , но не являются точками глобального экстремума J . (Важно для численной/лабораторной оптимизации).

Гипотеза [Rabitz, Hsieh, Rosenthal]²: Отсутствие ловушек у J_O и J_W для любого N .

²[H.A. Rabitz, M.M. Hsieh, C.M. Rosenthal, *Science* **303**, 1998–2001 (2004)] и др. работы.

Отсутствие ловушек в кинематическом ландшафте

Мотивация:

$$J_{O,W}[f] = F_{O,W}(U_T^f),$$

где функции $F_{O,W}: U(N) \rightarrow \mathbb{R}$ не имеют точек локальных, но не глобальных экстремумов.

- J. von Neumann (1937)
- R. Brockett (1989)
- H. Rabitz, M. Hsieh, C. Rosenthal (2004 и далее)

Ловушки в динамическом ландшафте управления

Управление f **регулярное**, если дифференциал Фреше $U'_T(f)$ сюръективен. В противном случае оно называется **особым**. Из предыдущего слайда и цепного правила

$$J'_{O,W}(f) = F'_{O,W}(U_T^f) \circ U'_T(f)$$

следует, что регулярное управление не может быть ловушкой.

Ловушка второго порядка — критическое управление, которое не является точкой глобального максимума, и в котором гессиан является отрицательно полуопределенным.

Пример ловушки второго порядка для 3-уровневого Λ -атома в [³]. Примеры ловушек для $n \geq 4$ в [⁴].

³A.N. Pechen, D.J. Tannor, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 120402 (2011).

⁴P. de Fouquieres, S.G. Schirmer, *Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.* **16**, 1350021 (2013).

Ловушки старших порядков^{5,6}

Ловушка порядка $n \geq 2$ для ЦФ J — такое управление $f_0 \in L_2([0, T], \mathbb{R})$, что (а) f_0 не является точкой глобального максимума для J и (б) разложение Тейлора в окрестности f_0 имеет вид

$$J(f_0 + \delta f) = J(f_0) + \sum_{j=2}^n \frac{1}{j!} J^{(j)}(f_0)(\delta f, \dots, \delta f) + o(\|\delta f\|^n) \text{ при } \|\delta f\| \rightarrow 0,$$

где $R(\delta f) := \sum_{j=2}^n \frac{1}{j!} J^{(j)}(f_0)(\delta f, \dots, \delta f)$ — ненулевой полином, причем для любого $\delta f \in L_2([0, T], \mathbb{R})$ существует $\varepsilon > 0$, что $R(t\delta f) \leq 0$ для всех $t \in (-\varepsilon, \varepsilon)$.

⁵A.N. Pechen, D.J. Tannor, *Israel J. Chem.* **52**, 467 (2012).

⁶Б.О. Волков, А.Н. Печень, Ловушки высших порядков в задачах квантового управления для некоторых сильно вырожденных систем, УМН, **78**, 191–192 (2023).

Ловушки старших порядков для некоторых сильно вырожденных квантовых систем⁷

Рассмотрим N -уровневую квантовую систему с гамильтонианами (H_0, V) :

$$H_0 = a|1\rangle\langle 1| + \sum_{k=2}^N b|k\rangle\langle k|, \quad V = \sum_{k=1}^{N-1} \bar{v}_k|k\rangle\langle k+1| + v_k|k+1\rangle\langle k|.$$

Здесь $a \neq b$ и все $v_k \in \mathbb{R}$ ненулевые.

Теорема 1. Пусть $N \geq 3$, $\rho_0 = |N\rangle\langle N|$ и $O = \sum_{k=1}^N \lambda_k|k\rangle\langle k|$ такое, что $\lambda_1 > \lambda_N > \lambda_{N-1}$. Тогда для $T \geq T_{\min}$ управление $f_0 \equiv 0$ является ловушкой порядка $2N - 3$ для функционала J_O .

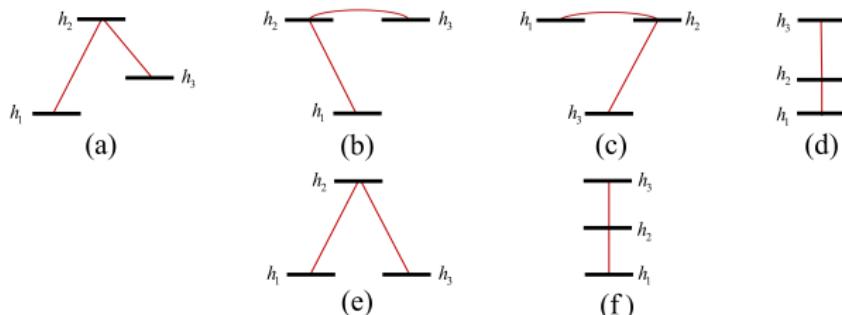
⁷Б.О. Волков, А.Н. Печень, УМН, **78**, 191–192 (2023).

Трехуровневая квантовая система с одним запрещенным прямым переходом

Пусть свободный гамильтониан и гамильтониан взаимодействия

$$H_0 = \begin{pmatrix} h_1 & 0 & 0 \\ 0 & h_2 & 0 \\ 0 & 0 & h_3 \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & v_{12} & 0 \\ v_{12}^* & 0 & v_{23} \\ 0 & v_{23}^* & 0 \end{pmatrix},$$

где $h_i \in \mathbb{R}$ и $v_{12}, v_{23} \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. Две разрешенные частоты перехода: $\omega_1 = h_2 - h_1$ и $\omega_2 = h_3 - h_2$.

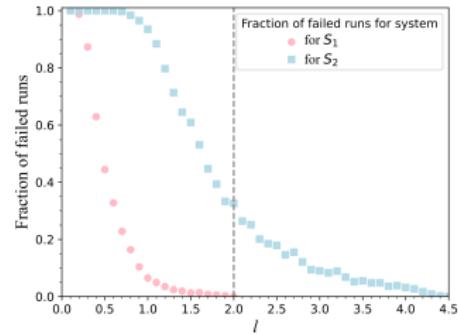


Теорема 2⁸. Пусть $\rho_0 = |3\rangle\langle 3|$ и $O = \sum_{k=1}^3 \lambda_k |k\rangle\langle k|$ такое, что $\lambda_1 > \lambda_3 > \lambda_2$. Для достаточно больших времен T :

1. если $\omega_1 \neq \omega_2$, то нулевое управление $f_0 \equiv 0$ является ловушкой 3-го порядка для ЦФ J_O ;
2. если $\omega_1 = \omega_2 \neq 0$ и $|v_{12}| \neq |v_{23}|$, то нулевое управление $f_0 \equiv 0$ является ловушкой 7-го порядка для ЦФ J_O .

Первый случай первоначально был доказан для Λ -атома $(0 < -\omega_2 < \omega_1)$ ^{9,10}.

Численный анализ, выполненный методом GRAPE для некоторых систем, показывает, что ловушки 7-го порядка существенно затрудняют практическую оптимизацию.



⁸B. Volkov, A. Myachkova, A. Pechen, arXiv:2404.06937 (2024).

⁹A.N. Pechen, D.J. Tannor, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 120402 (2011).

¹⁰A.N. Pechen, D.J. Tannor, *Israel J. Chem.* **52**, 467 (2012).

Отсутствие ловушек для $N = 2$ и больших времен T

Рассмотрим $N = 2$:

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

В этом случае есть: только одно особое управление f_0 , а именно

$$f_0 = \frac{-\text{Tr} H_0 \text{Tr} V + 2\text{Tr}(H_0 V)}{(\text{Tr} V^2)^2 - 2\text{Tr}(V^2)},$$

а также специальное время T_0 , а именно

$$T_0 := \frac{\pi}{\|H_0 - \mathbb{I}\text{Tr} H_0/2 + f_0(V - \mathbb{I}\text{Tr} V/2)\|}.$$

Теорема 3^{11,12}. Если $N = 2$, то особое управление f_0 не является ловушкой для $J_{O,W}$ при $T \geq T_0$.

¹¹A.N. Pechen, N.B. Il'in, *Phys. Rev. A* **86**, 052117 (2012).

¹²A.N. Pechen, N.B. Il'in, *Izv. Math.* **80**, 1200–1212 (2016).

Квантовый вентиль типа сдвига фазы^{13,14}

Общий случай сводится к $H_0 = \sigma_z$ и $V = v_x \sigma_x + v_y \sigma_y$, где $v_x, v_y \in \mathbb{R}$ ($v_x^2 + v_y^2 > 0$) и $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ — матрицы Паули:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Если $[W, \sigma_z] \neq 0$, то ловушек нет при $T > 0$.

Однокубитный квантовый вентиль типа сдвига фазы:

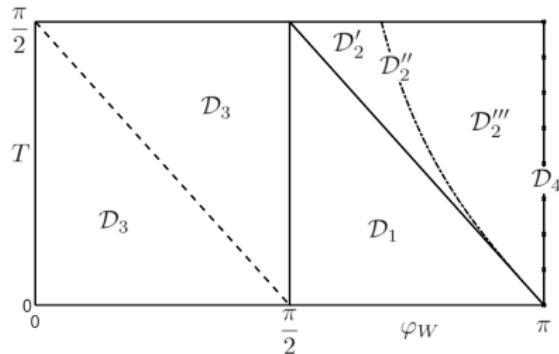
$$W = e^{i\varphi_W \sigma_z}, \text{ где } \varphi_W \in (0, \pi].$$

В этом случае $T_0 = \frac{\pi}{2}$ и особое управление $f_0 \equiv 0$.

¹³A.N. Pechen, N.B. Il'in, *Izv. Math.* **80**, 1200–1212 (2016).

¹⁴B.O. Volkov, O.V. Morzhin, A.N. Pechen, *J. Phys. A* **54**, 215303 (2021).

Подробная структура квантового ландшафта¹⁵



Теорема 4. Спектр гессиана в точке f_0 состоит из: бесконечного числа отрицательных собственных значений при $(\varphi_W, T) \in \mathcal{D}_1$; из двух положительных и бесконечного числа отрицательных собственных значений при $(\varphi_W, T) \in \mathcal{D}_2$; из одного положительного и бесконечного числа отрицательных собственных значений при $(\varphi_W, T) \in \mathcal{D}_3$ и $\varphi_W + T < \pi/2$; из одного отрицательного и бесконечного числа положительных собственных значений при $(\varphi_W, T) \in \mathcal{D}_3$ и $\varphi_W + T > \pi/2$ или $(\varphi_W, T) \in \mathcal{D}_4$.

¹⁵B.O. Volkov, A.N. Pechen, On the detailed structure of quantum control landscape for fast single qubit phase-shift gate generation, *Изв. РАН. Сер. матем.* **87**, 57–70 (2023).

Ландшафты для открытых квантовых систем

Мастер-уравнение с зависящими от времени скоростями
релаксации¹⁶

$$\frac{d\rho_t}{dt} = \mathcal{L}_t^{u,n} \rho_t := -i[H_t^{u,n}, \rho_t] + \varepsilon \underbrace{\sum_k \gamma_k(t) \mathcal{D}_k \rho_t}_{\mathcal{D}_t^n \rho_t}, \quad \rho_{t=0} = \rho_0.$$

$u(t) = \{u_j(t)\} \in L_\infty([0, T], \mathbb{R}^{K_u})$ — когерентное упр.,

$n(t) = \{n_l(t)\} \in L_\infty([0, T], \mathbb{R}_+^{K_n})$ — некогерентное упр., $n_l(t) \geq 0$

ЦФ среднего значения квантовой наблюдаемой O :

$$J_O[f] = \text{Tr}(O \rho_T), \quad f = (u, n).$$

¹⁶A. Pechen, H. Rabitz, *Phys. Rev. A* **73**, 062102 (2006).

Задача генерации квантовых вентилей

Мастер-уравнение на супероператор эволюции (квантовый канал) $\Phi_t^{u,n}$, $\rho_t = \Phi_t^{u,n}(\rho_0)$:

$$\begin{aligned}\frac{d\Phi}{dt} &= \mathcal{L}_t^{u,n}\Phi, \quad \Phi_0^{u,n} = \text{Id}_N, \quad t \in [0, T], \\ \mathcal{L}_t^f &= \mathcal{K} + f_\mu(t)\mathcal{N}^\mu, \quad f = (u, n).\end{aligned}$$

Квантовый канал — вполне положительный сохраняющий след супероператор.

Задача найти управление, которое при фиксированном T определяет супероператор $\Phi_T^{u,n}$, наиболее близкий к желаемому, например, унитарному квантовому каналу

$$\Phi_U(\rho) = U\rho U^\dagger.$$

Целевые функционалы

Квадрат расстояния Гильберта-Шмидта между целевым унитарным каналом Φ_U и Φ :

$$F_U^{\text{sd}}(\Phi) = \frac{1}{2N^2} \|\Phi - \Phi_U\|^2, \quad \|\Phi\|^2 = \text{Tr}(\Phi^\dagger \Phi).$$

Среднее расстояние Гильберта-Шмидта между действиями Φ и Φ_U на три специальных матрицы плотности $\{\rho_i\}_{i=1}^3$:

$$F_U^{\text{GRK, sd}}(\Phi) = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^3 \|\Phi \rho_i - \Phi_U \rho_i\|^2.$$

Среднее скалярного произведения Гильберта-Шмидта между действиями Φ и Φ_U на три матрицы плотности $\{\rho_i\}_{i=1}^3$:

$$F_U^{\text{GRK, sd}}(\Phi) = 1 - \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \frac{\text{Tr}(\Phi \rho_i \Phi_U \rho_i)}{\text{Tr} \rho_i^2}.$$

Incoherent GRadient Ascent Pulse Engineering (inGRAPE)

Вариации Фреше этих функционалов имеют вид:¹⁷

$$\frac{\delta J_U^{\text{sd}}[f]}{\delta f_\mu(t)} = \frac{1}{N^2} \text{Tr} \left((\Phi_T^f - \Phi_U)^\dagger \Phi_T^f (\mathcal{N}_t^f)^\mu \right),$$

$$\frac{\delta J_U^{\text{GRK, sd}}[f]}{\delta f_\mu(t)} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \text{Tr} \left((\Phi_T^f \rho_i - \Phi_U \rho_i) \Phi_T^f (\mathcal{N}_t^f)^\mu \rho_i \right),$$

$$\frac{\delta J_U^{\text{GRK, sp}}[f]}{\delta f_\mu(t)} = - \sum_{i=1}^3 \frac{1}{3 \text{Tr} \rho_i^2} \left(\text{Tr} \left[\Phi_U \rho_i \Phi_T^f (\mathcal{N}_t^f)^\mu \rho_i \right] \right).$$

Полученные так градиенты ЦФ служат основой разработанного нами метода анализа ландшафтов для открытых квантовых систем Incoherent GRadient Ascent Pulse Engineering (inGRAPE).¹⁸

¹⁷A.N. Pechen, V.N. Petruhanov, O.V. Morzhin, B.O. Volkov, Control landscapes for high-fidelity generation of C-NOT and C-PHASE gates with coherent and environmental driving, *Eur. Phys. J. Plus* **139**, 411 (2024).

¹⁸V. Petruhanov, A. Pechen, GRAPE optimization for open quantum systems with time-dependent decoherence rates driven by coherent and incoherent controls, *J. Phys. A* **56**, 305303 (2023).

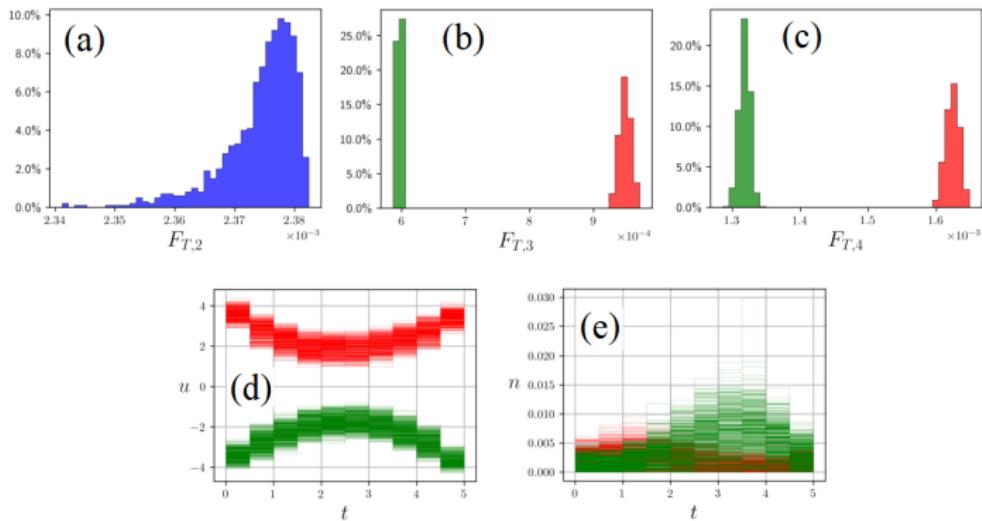
Генерация однокубитных вентилей H и T^{19}

В качестве приложения метода inGRAPE исследовались задачи генерации однокубитных вентилей Адамара (H) и $\pi/8$ (T) из универсального набора ($H, T, CNOT$) при наличии диссипации и с одновременными когерентным и некогерентным управлениями. Для вентиля H установлено плавное распределение наилучших полученных с помощью inGRAPE значений ЦФ с одним максимумом, в то время как для вентиля T построенное распределение значений ЦФ имеет два раздельных максимума с управлениями, существенно отделенными в пространстве управлений.

¹⁹V.N. Petruhanov, A.N. Pechen, Quantum control landscapes for generation of H and T gates in an open qubit with both coherent and environmental drive, *Photonics* **10**, 1200 (2023).

Пример: Генерация однокубитного вентиля T ($\pi/8$)²⁰

(a–c) Гистограммы с полученными методом inGRAPE значениями трех ЦФ (детали в статье) для 10^3 случайных начальных управлений. Два отдельных максимума показаны зеленым и красным. (d,e) Соответствующие когерентные (d) и некогерентные (e) управления.



²⁰V.N. Petruhanov, A.N. Pechen, *Photonics* **10**, 1200 (2023).

Генерация двухкубитных вентилей CNOT, CPHASE, SWAP

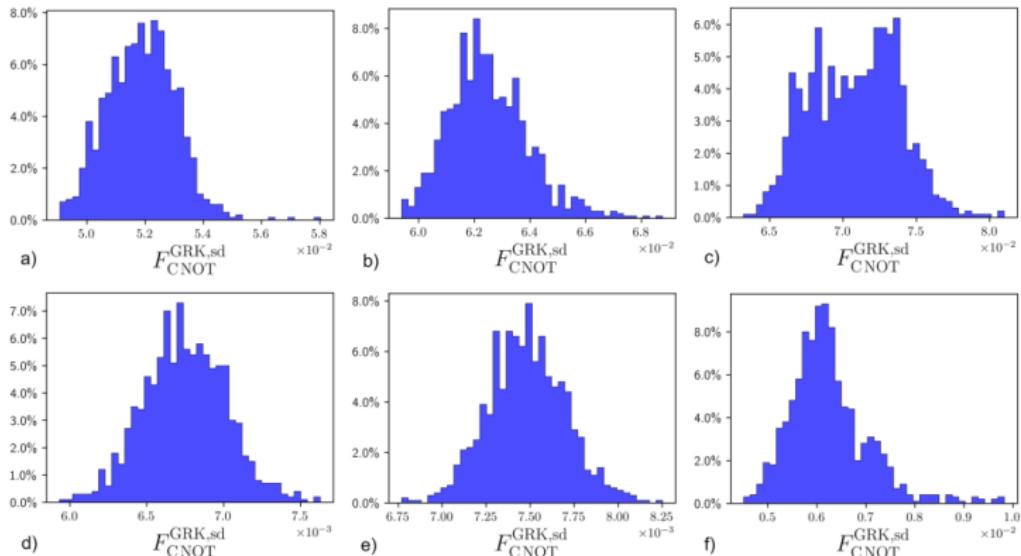
Также в качестве приложения метода inGRAPE исследовались задачи генерации двухкубитных вентилей в открытых квантовых системах^{21,22}, получены выражения для градиентов и гессианов, применены метод inGRAPE и метод обобщенной имитации отжига с локальным поиском, для вентилей CPHASE (с разными фазами), CNOT, SWAP. В отличие от задач генерации вентилей Н и Т, для двухкубитных вентилей CNOT и CPHASE получены плавные распределения с одним максимумом, с возможным исключением для вентиля CPHASE($\pi/2$), указывающие на структуру ландшафта без ловушек.

²¹A.N. Pechen, V.N. Petruhanov, O.V. Morzhin, B.O. Volkov, *Eur. Phys. J. Plus* **139**, 411 (2024).

²²O.V. Morzhin, A.N. Pechen, Generation of C-NOT, SWAP, and C-Z gates for two qubits using coherent and incoherent controls and stochastic optimization, *Lobachevskii J. Math.* **45**:2, 728–740 (2024).

Пример: Генерация двухкубитного вентиля CNOT²³

Гистограммы с полученными методом inGRAPE значениями ЦФ для трех гамильтониана (детали в статье) для 10^3 случайных начальных управлений.



²³A.N. Pechen, V.N. Petruhanov, O.V. Morzhin, B.O. Volkov, *Eur. Phys. J. Plus* **139**, 411 (2024).

Заключение

Для замкнутых и открытых квантовых систем исследуются локальные свойства целевых функционалов задач оптимизации среднего значения квантовой наблюдаемой и генерации квантовых операций.

Для разных типов замкнутых квантовых систем строго доказано наличие ловушек различных порядков, численно оценено их влияние на оптимизацию.

Для открытых квантовых систем разработан метод анализа ландшафтов, основанный на построении различных целевых функционалов, получении аналитических выражений для градиентов (вариации Фреше) и гессианов и разработанной нами для открытых квантовых систем версии inGRAPE метода GRAPE.

Ссылки: [A.N. Pechen, V.N. Petruhanov, O.V. Morzhin, B.O. Volkov, Control landscapes for high-fidelity generation of C-NOT and C-PHASE gates with coherent and environmental driving, *Eur. Phys. J. Plus* **139**, 411 (2024)] и др. работы.

Спасибо за внимание!