РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. В.А. СТЕКЛОВА

На правах рукописи

Печень Александр Николаевич

НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ДИНАМИКИ И УПРАВЛЕНИЯ КВАНТОВЫМИ СИСТЕМАМИ

01.01.03 — математическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Москва 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук.

Официальные оппоненты: Манько Владимир Иванович,
доктор физико-математических наук,
главный научный сотрудник
ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева
Российской академии наук.

Сачков Юрий Леонидович,
доктор физико-математических наук, доцент,
руководитель Исследовательского центра процессов
управления ФГБУН Институт программных систем
имени А.К. Айламазяна Российской академии наук.

Смолянов Олег Георгиевич,
доктор физико-математических наук, профессор
кафедры теории функций и функционального анализа
механико-математического факультета Московского
государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего профессионального образования
«Московский физико-технический институт
(государственный университет)».

Защита состоится 17 апреля 2014 года в 14:00 час. на заседании диссертационного совета Д 002.022.02 при ФГБУН Математический институт им. В.А. Стеклова РАН по адресу: 119991, Москва, ГСП-1, ул. Губкина, д. 8, Математический институт им. В.А. Стеклова РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Математического института им. В.А. Стеклова РАН.

Автореферат разослан: “___” декабря 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук Ю.Н. Дрожжинов

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Одной из активно развивающихся областей современной математической физики является исследование динамики и управления квантовыми системами. Важным случаем являются открытые квантовые системы, то есть системы, взаимодействующие с окружением. Такими системами являются, например, атом, молекула, наночастица, взаимодействующие с излучением или газом, химические реагенты в растворе, электрон в квантовой точке с окружением из ядерных спинов и так далее. Изучение динамики открытых квантовых систем имеет важное значение для исследования вопросов декогеренции, стремления к равновесию, проблемы квантового измерения, проблемы необратимости. Изучение вопросов управления важно для оптимального контроля химических реакций, в квантовой оптике, квантовой информации, квантовых вычислениях.

Важной задачей в динамике открытых квантовых систем является вывод из точных уравнений Шредингера и Гейзенберга мастер-уравнений, описывающих усредненную по состоянию резервуара, то есть редуцированную, динамику системы. Точные мастер-уравнения, как правило, сложны для практических вычислений. Однако в некоторых физически интересных режимах точные решения таких уравнений аппроксимируются решениями значительно более простых марковских уравнений. Такими режимами являются режим слабой связи и режим малой плотности. В режиме слабой связи взаимодействие между системой и резервуаром является малым. В режиме малой плотности мала плотность числа частиц резервуара, в то время как взаимодействие может быть сильным. В обоих случаях упрощенное описание возникает на больших временах t, соответствующих кинетическому этапу эволюции. Формально пределы слабой связи и малой плотности определяются как $\lambda \to 0$, $t \to +\infty$, $\lambda^2 t = \mathrm{const}$ и $n \to 0$, $t \to +\infty$, $nt = \mathrm{const}$, где λ — константа связи и n — плотность числа частиц резервуара. В приложениях режим слабой связи описывает, например, динамику атомов или молекул, взаимодействующих с излучением; режим малой плотности — широкий круг задач о столкновительной декогеренции. Изучение динамики в этих режимах проводилось в многочисленных работах, начиная с работ Н.Н. Боголюбова, Л. ван Хова, И. Пригожина. Редуцированная динамика изучалась в работах Е.Б. Дэвиса (E.B. Davies), Р. Думке (R. Dümcke), Д. Лебовица (J. Lebowitz), Г. Шпона (H. Sponh), К. Хорнбергера (K. Hornberger), Б. Ваккини (B. Vacchini) и других авторов. Многие результаты по теории открытых квантовых систем изложены в книгах E.B. Davies “Quantum theory of open systems” (London: Academic Press, 1976), L. Accardi, Y. Lu, I.V. Volovich “Quantum theory and its stochastic limit” (Springer, 2002), Ю.М. Белоусова, В.И. Манько “Матрица плотности. Представления и применения в статистической механике” (М.: МФТИ, 2004), S. Attal, A. Joye, C.A. Pillet “Open quantum systems: the Markovian approach” (Springer, 2006), В.Е. Тарасова “Quantum mechanics of non-Hamiltonian and dissipative systems” (Elsevier Science, 2008), Х.П. Бройера, Ф. Петруччионе “Теория открытых квантовых систем” (РХД, 2010), М.Г. Иванова “Как понимать квантовую механику” (РХД, 2012). Возникающие в пределах слабой связи и малой плотности мастер-уравнения типа Горини-Коссаковского-Сударшана-Линдблада широко используются в диссертационной работе.

Значительно более сложной задачей является вывод приближённых уравнений, описывающих в этих режимах эволюцию полной системы. В работах Л. Аккарди, И.В. Воловича, Ю. Лу разработан метод стохастического предела, позволяющий выводить квантовые стохастические уравнения для полной системы в пределе слабой связи. Данный метод, использующий аппроксимацию описывающих резервуар операторов операторами квантового белого шума, применялся в работах Л. Аккарди, И.В. Воловича, С.В. Козырева, Ф. Багарелло (F. Bagarello), Г. Кимура (G. Kimura), К. Имафуку (K. Imafuku), К. Юаса (K. Yuasa) и других авторов к изучению динамики открытых квантовых систем в пределе слабой связи, то есть в пределе $\lambda \to 0$. Задача получения уравнений, описывающих поправки по λ, и разработка метода вывода уравнений в пределе малой плотности решены в работах А.Н. Печеня, Л. Аккарди, И.В. Воловича.

Одним из изучаемых в диссертации вопросов является установление связи динамики открытых квантовых систем в пределе малой плотности с теорией свободной вероятности (англ.: free probability) и свободной статистикой. Теория свободной (квантовой) вероятности есть раздел теории квантовой вероятности, предметом изучения которой являются некоммутативные случайные величины. Случайными величинами в теории квантовой вероятности являются элементы некоторой, в общем случае, некоммутативной $*$-алгебры $\mathcal{A}$, а вероятностной мерой является состояние ϱ на $\mathcal{A}$. Теория свободной вероятности получила развитие в работах Д. Войкулеску в середине 1980-х годов в контексте алгебр фон Неймана свободных групп. Однако еще в 1967 году В. Марченко и Л. Пастуром была получена формула, описывающая асимптотическое поведение собственных значений случайных матриц — распределение Марченко-Пастура, имеющее тот же вид, что и распределение свободного процесса Пуассона в теории свободной вероятности[1]. Впоследствии теория свободной вероятности стала развиваться как самостоятельный раздел математики с приложениями в основном в теории случайных матриц. В диссертации показано, что квантовый белый шум со свободной статистикой также возникает при изучении динамики открытых квантовых систем в пределе малой плотности, что дает новый пример возникновения свободной статистики и свободной вероятности в математической физике.

Тесно связанными с вопросами динамики являются задачи управления квантовыми системами. Теория оптимального управления возникла в конце 1950-х – начале 1960-х годов, когда был разработан принцип максимума Понтрягина в работах Л.С. Понтрягина, В.Г. Болтянского, Р.В. Гамкрелидзе, Е.Ф. Мищенко и метод динамического программирования Беллмана. Некоторые проблемы управления квантовыми системами, такие, как задача оптимальной фильтрации квантовых переменных, рассматривались в начале 1970-х годов (Б.А. Гришанин, Р.Л. Стратонович). Активное внимание задачи квантового управления стали привлекать в конце 1970-х – начале 1980-х годов в работах В.П. Белавкина, А.Г. Бутковского, П. Брюмера, В.С. Летохова, Х. Рабица, С.А. Райса, Ю.И. Самойленко, Д. Тэннора, М. Шапиро и других

[1]Марченко В. А., Пастур Л. А. Распределение собственных значений в некоторых ансамблях случайных матриц // Математический сборник. 1967. Т. 72(114). № 4. С. 507–536.

авторов. В настоящее время научные коллективы, занимающиеся вопросами управления квантовыми системами, работают во многих ведущих университетах мира. Ежегодно согласно *Web of Science* по данному направлению публикуется около 1300 статей, в том числе в журналах *Science* и *Nature*. Нобелевская премия по физике 2012 года вручена Сержу Арошу и Дэвиду Вайнлэнду за прорывные экспериментальные методы для измерения и манипулирования индивидуальными квантовыми системами. Различные теоретические и экспериментальные результаты в области управления квантовыми системами изложены в ряде книг, включая книги А.Г. Бутковского и Ю.И. Самойленко “Управление квантовомеханическими процессами” (М.: Наука, 1984), S.A. Rice и M. Zhao “Optical control of molecular dynamics” (New York: Wiley, 2000), P.W. Brumer и M. Shapiro “Principles of the quantum control of molecular processes” (Wiley-Interscience, 2003), сборник статей под ред. А.Л. Фрадкова и О.А. Якубовского “Управление молекулярными и квантовыми системами” (Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003), книги V.S. Letokhov “Laser control of atoms and molecules” (Oxford University, 2007), D. D’Alessandro, “Introduction to quantum control and dynamics” (Chapman and Hall, 2007), D.J. Tannor “Introduction to quantum mechanics: a time dependent perspective” (Sausalito: University Science Press, 2007). Тесно связанными с задачами квантового управления являются задачи управления на группах Ли и теория геометрического управления, изложенная в книге А.А. Аграчева и Ю.Л. Сачкова “Геометрическая теория управления” (М.: Физматлит, 2005).

Большое внимание уделяется изучению когерентного управления изолированными от окружения (замкнутыми) n-уровневыми квантовыми системами. Широкий класс задач управления для таких систем ставится как задача максимизации функционалов вида $\mathscr{F}(f) = \mathcal{F}(U_T^f)$, где U_T^f есть унитарный оператор, описывающий эволюцию системы от момента времени $t = 0$ до финального момента времени $T > 0$ под действием управления $f(t)$, и $\mathcal{F} : U(n) \to \mathbb{R}$ — некоторая функция на унитарной группе. Для замкнутых систем исследовались вопросы управляемости, различные алгоритмы поиска оптимальных управлений и многие другие проблемы. Важной актуальной темой является исследование ландшафтов управления, то есть графиков целевых функционалов, описывающих задачи управления квантовыми системами, в том числе изучение ловушек — локальных экстремумов, не являющихся глобальными. Различают динамические и кинематические ландшафты — графики функционалов $\mathscr{F}(f)$ и функций $\mathcal{F}(U)$, соответственно. Исследование кинематических ландшафтов можно связать с работой фон Неймана 1937-го года, посвященной изучению экстремумов следовых функций на унитарных группах[2], и с работой Брокетта, посвященной изучению экстремумов следовых функций на ортогональных группах[3] (однако в обоих работах в другом контексте). Исследование динамических ландшафтов задач квантового управления получило развитие в работе Рабица, Хсиеха и Розенталя[4], где было высказано предположение об отсутствии ловушек в динамических ландшафтах. Несмотря на большое количество последующих работ, доказать данное предположение удалось только для замкнутых двухуровневых квантовых систем [21] и для задачи управления коэффициентом прохождения частицы через барьер [22], в то время как для широкого класса замкнутых систем с числом уровней более двух доказано существование ловушек второго порядка — критических точек, не являющихся глобальными оптимумами и имеющих знако-полуопределенный гессиан целевого функционала [17, 20].

Предположение об изолированности управляемой системы нередко является слишком сильным — во многих приложениях взаимодействием квантовых систем с окружением нельзя пренебречь. Данное обстоятельство определяет практическую важность изучения задач управления взаимодействующими с окружением (открытыми) квантовыми системами. Такие задачи возникают в различных разделах физики и химии, от задач лазерного управления химическими реакциями в растворах и управления электроном в квантовой точке в окружении ядерных спинов до индуцирования зацепленных состояний и реализации квантовых вычислений со смешанными состояниями

[2] von Neumann J. Some matrix-inequalities and metrization of matric-space // Труды Томского университета. 1937. Т. 1. С. 286.

[3] Brockett R. Least squares matching problems // Lin. Alg. Appl. 1989. Т. 122/123/124. С. 761–777.

[4] Rabitz H., Hsieh M., Rosenthal C. Quantum optimally controlled transition landscapes // Science. 2004. Т. 303. С. 1998–2001.

и неунитарными квантовыми вентилями (D. Aharonov, A. Kitaev, N. Nisan, В.Е. Тарасов, J.I. Cirac и др.). Для открытых квантовых систем сформулирован принцип максимума Понтрягина (H. Jirari и W. Pötz), выведены уравнения Гамильтона-Якоби-Беллмана (J. Gough, В.П. Белавкин, О.Г. Смолянов), исследовались вопросы управляемости (C. Altafini, А.Н. Печень, T. Shulte-Herbruggen), управление с обратной связью (H.M. Wiseman, G.J. Milburn, H. Mabuchi), управление с помощью измерений (А.Б. Климов, В.И. Манько, L. Roa, K. Jacobs, А.Н. Печень, Н.Б. Ильин, C. Brif, H. Rabitz). Доказано отсутствие ловушек в кинематическом ландшафте задачи управления наблюдаемой для открытых квантовых систем [7, 8], что можно рассматривать как продолжение упомянутых выше работ фон Неймана и Брокетта на исследование экстремумов следовых функций на комплексных многообразиях Штифеля. Активно изучаются задачи, связанные с управлением квантовыми системами с помощью резервуара, что может быть необходимо, например, для квантовых вычислений со смешанными состояниями и неунитарными логическими элементами[5]. Решение некоторых задач управления для замкнутых и открытых квантовых систем входит в содержание диссертационной работы.

Цель работы:

(а) изучение статистики, описывающей квантовый газ, взаимодействующий с квантовой частицей в пределе малой плотности;

(б) анализ экстремумов целевых функционалов в динамическом описании для замкнутых квантовых систем;

(в) анализ экстремумов целевых функционалов в кинематическом описании для открытых квантовых систем;

(г) исследование управляемости открытых квантовых систем с использованием когерентного и некогерентного управлений;

(д) анализ управления квантовыми системами с использованием в качестве управляющего воздействия неселективных квантовых измерений.

[5] Aharonov D., Kitaev A., Nisan N. Quantum circuits with mixed states // Proceedings of 13th Annual ACM Symposium on Theory of Computation. 1997. C. 20–30.
Tarasov V. E. Quantum computer with mixed states and four-valued logic // J. Phys. A: Math. Gen. 2002. T. 35. C. 5207–5235.

Основные результаты:

1. Доказано возникновение свободной статистики в пределе малой плотности в модели, описывающей взаимодействие квантовой частицы с Бозе газом. Вычислены предельные разновременные корреляционные функции операторов резервуара.

2. Доказано наличие ловушек второго порядка (критических точек с отрицательно полуопределенным гессианом целевого функционала) в динамических ландшафтах широкого класса задач управления замкнутыми квантовыми системами с числом уровней $n \geq 3$.

3. Доказано, что комбинация когерентного управления и некогерентного управления с использованием состояния резервуара в качестве управляющего воздействия в модели с мастер-уравнением, соответствующим пределу слабой связи, при широких предположениях позволяет приближенно создавать любые матрицы плотности n-уровневой квантовой системы.

4. Доказано отсутствие ловушек (локальных экстремумов, не являющихся глобальными) в кинематическом и динамическом ландшафтах задачи управления коэффициентом прохождения частицы через потенциальный барьер. Доказано отсутствие ловушек в кинематическом ландшафте задачи максимизации наблюдаемой для двухуровневых открытых квантовых систем.

5. Решена задача максимизации вероятности перехода в трехуровневой системе с динамической симметрией с использованием когерентного управления совместно с неселективным квантовым измерением.

Методы исследования. В диссертации используются метод стохастического предела, операторные и алгебраические методы квантовой теории, теория обобщенных функций, методы математической физики, теория открытых квантовых систем, методы управления квантовыми системами, теория квантовой вероятности и квантовых случайных процессов, вариационные, асимптотические, геометрические методы, теория управления, выпуклый анализ, модели квантовой оптики.

Научная новизна. В диссертационной работе впервые получены следующие результаты. Доказано возникновение свободной статистики в пределе малой плотности для модели, описывающей квантовую систему, взаимодействующую с Бозе-газом, чем получен новый пример возникновения свободной статистики и свободной вероятности в математической физике. Доказано существование ловушек второго порядка для широкого класса задач управления квантовыми системами, что является крупным вкладом в решение фундаментальной задачи поиска всех экстремумов целевых функционалов для задач квантового управления. Доказана возможность приближенного создания произвольных матриц плотности для открытых квантовых систем, находящихся под воздействием когерентного и некогерентного управлений, что показывает возможность детерминистской реализации наиболее сильной степени управляемости в пространстве состояний квантовых систем. Найдено точное значение максимальной величины переноса населенности в трехуровневой системе с динамической симметрией при использовании когерентного управления и одного неселективного квантового измерения. Доказано отсутствие ловушек в кинематическом и динамическом ландшафтах задачи управления коэффициентом прохождения частицы через потенциальный барьер. Найдены все критические точки кинематического ландшафта задачи максимизации среднего значения квантово-механической наблюдаемой для двухуровневых открытых квантовых систем. Все основные результаты получены лично автором.

Теоретическая и практическая ценность. Диссертационная работа носит теоретический характер. Полученные результаты могут быть использованы для создания различных смешанных состояний квантовых систем, повышения робастности управления, оценки эффективности и выбора подходящих алгоритмов поиска оптимальных управлений. На работы автора по теме диссертации на дату 31.10.2013 имеется 259 цитирований согласно *Web of Science* и 294 цитирований согласно *GoogleAcademia*, в том числе имеются цитирования в высокорейтинговых мировых журналах *Science* и *Nature*. Обсуждению некоторых результатов работы посвящена статья "Look out for traps" в журнале *Science* (т. 332, с. 514) редактора этого журнала J.S. Yeston.

Апробация работы. Результаты, изложенные в диссертации, докладывались автором на общеинститутском семинаре и семинарах отдела математической физики Математического института им. В.А. Стеклова РАН, механико-математического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова (руководитель — О.Г. Смолянов), института программных систем им. А.К. Айламазяна РАН, института проблем машиноведения РАН, химического факультета Принстонского университета (США), университета штата Айова (США), математического факультета университета Техаса A&M (США), математического факультета Национального университета Мехико (Мексика), факультета химической физики института Вейцмана (Израиль), химического факультета Технического университета г. Мюнхен (Германия; руководитель S. Glaser), физического факультета университета г. Ульм (Германия; руководитель T. Calarco), а также на международных конференциях: "28-я конференция по квантовой вероятности" (Гуанахуато, Мексика, 2007), "Международная конференция по математической физике и её приложениям" (Самара, Россия, 2008), "Международная конференция по математической теории управления и механике" (Суздаль, Россия, 2009), Гордоновская конференция "Quantum control of light and matter" (Саут Хадли, США, 2009), Боголюбовская конференция "Проблемы теоретической и математической физики" (Дубна, Россия, 2009), "Конференция по созданию, манипулированию и характеризации квантовых состояний материи и излучения" (Барселона, Испания, 2010), "32-я конференция по квантовой вероятности" (Левико, Италия, 2011), "Конференция по математической теории управления и механике" (Суздаль, Россия, 2011), "Управление и оптимизация неголономных систем" (Переславль-Залесский, Россия, 2011), "Engineering and control of quantum systems" (Дрезден, Германия, 2011), "Проблема необратимости в классических и квантовых динамических системах" (Москва, Россия, 2011), Международный конгресс Оптического общества "Quantum information and measurement" (Берлин, Германия, 2012), симпозиум "Quantum dissipation and control" (Реховот, Израиль, 2012), Международный конгресс по математической физике (Ольбург, Дания, 2012), летняя школа "Взаимодействие математики и физики: новые перспективы" (Москва, Россия, 2012), Третья международная конференция “Математическая физика и ее приложения” (Самара, Россия, 2012), “Laser control of chemical reactions” (Цфат, Израиль, 2012), “Optimal control of quantum systems” (Саутгемптон, Англия, 2012), “Конференция по математической теории управления и механике” (Суздаль, Россия, 2013), “Управление и оптимизация неголономных систем” (Переславль-Залесский, Россия, 2013), Гордоновская конференция “Quantum control of light and matter” (Саут Хадли, США, 2013), “34-я конференция по квантовой вероятности” (Москва, Россия, 2013).

Структура и объем работы. Диссертация состоит из *Введения*, пяти *Глав*, *Заключения* и *Списка литературы* (249 наименований). Объем диссертации составляет 194 страницы.

Благодарности. В первую очередь автор хочет выразить благодарность профессору И.В. Воловичу, оказавшему существенное влияние на выбор темы исследования, и коллегам — профессору университета г. Рима Luigi Accardi, профессору Принстонского университета Herschel Rabitz, профессору института имени Вейцмана David J. Tannor, К. Брифу, Р. Ву (Rebing Wu), Р. Ву (Rong Wu), Д. Домини (Jason Dominy), Н.Б. Ильину, С.В. Козыреву, А. Озе (Anand Oza), Д. Прохоренко, Ф. Шуангу (Feng Shuang). Исследования частично поддержаны следующими фондами: Российский фонд фундаментальных исследований, INTAS, Национальный научный совет Италии, Европейская Комиссия (грант имени Марии Кюри 7-й Рамочной Программы), Министерство образования и науки Российской Федерации (соглашение № 8215), Совет по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и по государственной поддержке ведущих научных школ (стипендия Президента Российской Федерации).

Содержание работы

Введение содержит краткий обзор литературы, формулировку целей исследования, основные результаты, описание структуры диссертационной работы.

Значительная часть работы посвящена открытым квантовым системам.

Открытой квантовой системой называется квантовая система (электрон, атом, молекула, наночастица), также называемая “система”, “пробная частица”, которая взаимодействует с резервуаром (излучение, квантовый газ, измерительный прибор). Если система имеет n уровней энергии, то есть является n-уровневой, то ее состояние в момент времени t описывается матрицей плотности ρ_t, являющейся положительной матрицей (в общем случае с комплексными элементами) с единичным следом. Множество всех матриц плотности n-уровневой системы обозначим как $\mathcal{D}_n = \{\rho \in \mathbb{C}^{n\times n} \,|\, \rho \geq 0, \mathrm{Tr}\rho = 1\}$, где Tr обозначает след матрицы.

Чтобы описать динамику открытой системы из первых принципов, нужно задать гильбертово пространство полной системы $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\mathrm{S} \otimes \mathcal{H}_\mathrm{R}$, где $\mathcal{H}_\mathrm{S}$ и $\mathcal{H}_\mathrm{R}$ — гильбертовы пространства системы и резервуара, и гамильтониан полной системы $H = H_0 + H_\mathrm{int}$, где $H_0 = H_\mathrm{S} \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes H_\mathrm{R}$ — свободный гамильтониан, H_S и H_R — свободные гамильтонианы системы и резервуара, H_int — гамильтониан взаимодействия системы с резервуаром. Далее, если не оговорено иначе, рассматриваются n-уровневые системы. Соответствующее гильбертово пространство есть $\mathcal{H}_\mathrm{S} = \mathbb{C}^n$. Гильбертовым пространством резервуара является пространство Фока $\mathcal{H}_\mathrm{R} = \Gamma_\mathrm{sym}(\mathcal{H}_1)$ над некоторым одночастичным пространством (далее рассматривается бозонный резервуар и, соответственно, симметричное пространство Фока). Свободный гамильтониан резервуара есть вторичное квантование гамильтониана H_1 одной частицы резервуара (например, оператора $H_1 = -\Delta$ в $L^2(\mathbb{R}^3)$), $H_\mathrm{R} = d\Gamma(H_1)$. Свободная эволюция одной частицы резервуара описывается однопараметрической унитарной группой $S_t = \mathrm{e}^{\mathrm{i}tH_1}$. Для резервуара, состоящего из частиц в $\mathbb{R}^3$, одночастичное гильбертово пространство и свободный гамильтониан есть $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^3)$ и $H_\mathrm{R} = \int d\mathbf{k}\omega(\mathbf{k})a^+(\mathbf{k})a(\mathbf{k})$, где $a^+(\mathbf{k})$ и $a(\mathbf{k})$ есть операторы рождения и уничтожения частицы с импульсом $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$, $\omega(\mathbf{k})$ — энергия частицы с импульсом $\mathbf{k}$.

Динамика полной системы определяется оператором эволюции, имеющим в представлении взаимодействия вид $U(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}tH_0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tH}$. Если начальное состояние полной системы имеет вид $\rho_0 \otimes \varrho_0$, где ρ_0 и ϱ_0 есть начальные состояния системы и резервуара, то состояние интересующей нас подсистемы в момент времени t описывается редуцированной матрицей плотности $\rho_t = \mathrm{Tr}_{\mathrm{R}}[U(t)(\rho_0 \otimes \varrho_0)U^\dagger(t)]$, где Tr_{R} обозначает частичный след по подпространству $\mathcal{H}_{\mathrm{R}}$. Как правило, уравнения для полной и редуцированной динамики не поддаются точному решению. Однако существуют физические режимы, в которых точная динамика аппроксимируется относительно легко решаемыми уравнениями. Такими режимами являются режим слабой связи и режим малой плотности. В обоих режимах динамика полной системы сходится к решению некоторого квантового стохастического дифференциального уравнения, в то время как редуцированная динамика сходится к решению марковского мастер-уравнения. Квантовые стохастические дифференциальные уравнения в пределе малой связи выведены в книге Л. Аккарди, Ю. Лу и И.В. Воловича[6], а в пределе малой плотности — в работах Л. Аккарди, А.Н Печеня и И.В. Воловича[7]. Конкретный вид предельных уравнений зависит от типа предела и от структуры гамильтониана полной системы.

В **главе 1** изучается предельная статистика резервуара, возникающая при описании из первых принципов динамики открытых квантовых систем, взаимодействующих с Бозе газом в режиме малой плотности. Изложение следует работе [1]. Взаимодействие квантовой системы с Бозе-газом описывается гамильтонианом взаимодействия вида

$$H_{\mathrm{int}} = \sum_l [Q_l^\dagger \otimes N(T_l) + Q_l \otimes N(T_l^\dagger)] \tag{1}$$

Здесь $Q_l \in B(\mathcal{H}_{\mathrm{S}})$, $T_l \in \mathcal{T}(\mathcal{H}_1)$, $B(\mathcal{H}_{\mathrm{S}})$ — множество ограниченных операторов в $\mathcal{H}_{\mathrm{S}}$, $\mathcal{T}(\mathcal{H}_1)$ — множество операторов в $\mathcal{H}_1$ с конечным следом и $N(T_l) = d\Gamma(T_l)$ — вторичное квантование оператора T_l в симметричном пространстве Фока $\Gamma_{\mathrm{sym}}(\mathcal{H}_1)$. Например, для $T = |f\rangle\langle g|$ имеем $N(T) = A^+(f)A(g)$, где $A^+(f)$ и $A(g)$ обозначают бозонные операторы рождения и уничтожения, $f, g \in \mathcal{H}_1$. Полный гамильтониан системы есть $H = H_0 + H_{\mathrm{int}}$.

[6] Accardi L., Lu Y. G., Volovich I. V. Quantum theory and its stochastic limit. — Berlin: Springer, 2002.

[7] Accardi L., Pechen A. N., Volovich I. V. A stochastic golden rule and quantum Langevin equation for the low density limit // Infinite Dimensional Analysis, Quantum Probability & Related Topics. 2003. T. 6. C. 431–453.

Оператор эволюции $U(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}tH_0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t(H_0+H_{\mathrm{int}})}$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{dU(t)}{dt}=-\mathrm{i}\sum_l\Big[Q_l^\dagger(t)\otimes N(S_tT_lS_{-t})+Q_l(t)\otimes N(S_tT_l^\dagger S_{-t})\Big]U(t)$$

Здесь

$$Q_l(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}tH_{\mathrm{S}}}Q_l\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tH_{\mathrm{S}}}=\sum_{\omega\in\Omega}Q_{l,\omega}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\omega}$$

и Ω есть множество частот перехода в системе, то есть спектр $-\mathrm{i}[H_{\mathrm{S}},\cdot]$.

Резервуар предполагается в произвольном гауссовом, не обязательно гиббсовском, квази-свободном состоянии $\varrho_{\varepsilon\hat{n}}$ с двухточечной корреляционной функцией $\varrho_{\varepsilon\hat{n}}(A^+(f)A(g))=\varepsilon\langle g,\hat{n}f\rangle$, где $\varepsilon>0$ — малый параметр и $\hat{n}$ — ограниченный положительный оператор в $\mathcal{H}_1$, такой что $\forall t:\ [S_t,\hat{n}]=0$ $(S_t=\mathrm{e}^{\mathrm{i}tH_1})$. В типичном случае, когда $\mathcal{H}_1=L^2(\mathbb{R}^3)$ и одночастичный гамильтониан H_1 есть оператор умножения на функцию $\omega(\mathbf{k})=|\mathbf{k}|^2/2m$, где $\mathbf{k}$ и m есть импульс и масса частицы резервуара, оператор $\hat{n}$ является оператором умножения на функцию $n(\mathbf{k})$, $\mathbf{k}\in\mathbb{R}^3$. Физический смысл этой функции состоит в том, что величина $\varepsilon n(\mathbf{k})$ есть плотность числа частиц резервуара с импульсом $\mathbf{k}$. Таким образом, малые ε соответствуют малой плотности частиц резервуара.

Пределом малой плотности называется предел при

$$\varepsilon\to 0,\qquad t\to+\infty,\qquad \varepsilon t=\mathrm{const}$$

различных физических величин (например, оператора эволюции полной системы, редуцированной матрицы плотности, временной эволюции различных наблюдаемых, различных корреляционных функций и так далее). Удобно произвести замену $t\to t/\varepsilon$ и далее рассматривать только предел $\varepsilon\to 0$ с фиксированным t.

Оператор эволюции $U(t/\varepsilon)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\mathrm{d}U(t/\varepsilon)}{\mathrm{d}t}=-\mathrm{i}\sum_{l,\omega}\Big[Q_{l,\omega}^\dagger\otimes N_{T_l,\omega,\varepsilon}(t)+Q_{l,\omega}\otimes N_{T_l^\dagger,-\omega,\varepsilon}(t)\Big]U(t/\varepsilon)$$

где

$$N_{T_l,\omega,\varepsilon}(t):=\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\omega/\varepsilon}}{\varepsilon}N(S_{t/\varepsilon}T_lS_{-t/\varepsilon})$$

Далее основным объектом изучения является предел малой плотности для корреляционных функций операторов $N_{T,\omega,\varepsilon}(t)$.

В разделе 1.3 вводится диаграммная техника вычисления средних от произведений операторов $N_{T_i,0,\varepsilon}(t_i)$ с произвольными $T_i = |f_i\rangle\langle g_i|$, где $f_i, g_i \in \mathcal{H}_1$, $i = 1, 2, \ldots, n$. Положим $P_E := (2\pi)^{-1}\int \mathrm{d}t S_t \mathrm{e}^{-\mathrm{i}tE}$, $A_i^+ = \frac{\exp(\mathrm{i}t_i E_i)}{\sqrt{\varepsilon}} A^+(P_{E_i} f_i)$ и $A_i = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} A(S_{t_i/\varepsilon} g_i)$ (отметим, что оператор A_i^+ не является эрмитово сопряженным к A_i). Имеем $N_{T_i,0,\varepsilon}(t_i) = \int dE_i A_i^+ A_i$. Средние от произведений этих операторов по гауссову состоянию $\varrho_{\varepsilon\hat{n}}$ можно выразить в виде некоторой суммы произведений парных корреляционных функций $\langle A_i^\# A_j^\# \rangle := \varrho_{\varepsilon\hat{n}}(A_i^\# A_j^\#)$ (здесь символ # обозначает либо + в случае оператора A_i^+, либо пустое место для оператора A_i):

$$\langle N_{T_1,0,\varepsilon}(t_1) \ldots N_{T_n,0,\varepsilon}(t_n) \rangle = \sum{}' \int dE_1 \ldots dE_n \langle A_{i_1}^+ A_{j_1} \rangle \ldots \langle A_{i_k}^+ A_{j_k} \rangle \langle A_{j_{k+1}} A_{i_{k+1}}^+ \rangle \ldots \langle A_{j_n} A_{i_n}^+ \rangle$$

где $\sum'$ — сумма по всем $k = 1, \ldots, n$, $1 = i_1 < i_2 < \cdots < i_k$, $j_{k+1} < \cdots < j_n$, $i_l \le j_l$ для $l = 1, \ldots, k$ и $j_l < i_l$ для $l = k+1, \ldots, n$. Каждому слагаемому суммы можно поставить в соответствие диаграмму спариванием в строке $A_1^+ A_1 A_2^+ A_2 \ldots A_n^+ A_n$ пар операторов $A_{i_l}^+$ и A_{j_l} ($l = 1, 2, \ldots, n$). Стандартным образом определяются неприводимые диаграммы и соответствующие им усеченные корреляционные функции.

Далее исследуются нетривиальные в пределе $\varepsilon \to +0$ диаграммы, предельные корреляционные функции и изучается предельная статистика резервуара [1].

Теорема 1 *Для любого $n \in \mathbb{N}$ только одна неприводимая диаграмма не равна тождественно нулю при $\varepsilon \to +0$:*

$$A_1^+ A_1 A_2^+ A_2 A_3^+ A_3 A_4^+ \ldots A_{n-1} A_n^+ A_n \tag{2}$$

Данная диаграмма является непересекающейся, что указывает на связь с теорией свободной вероятности.

В разделе 1.4 вводится понятие свободного квантового белого шума. Определяются операторнозначные обобщенные функции свободного квантового белого шума $B_f^{\pm}(t)$, удовлетворяющие соотношению $B_f^-(t)B_g^+(t') = 2\pi\delta(t'-t)\langle f,g\rangle$, строятся операторы $N^{\rm free}_{|f\rangle\langle g|}(t) = \int dE B^+_{P_E f}(t) B^-_{P_E g}(t)$ типа свободных операторов числа частиц и некоторое состояние $\phi_{\hat n}$ на алгебре этих операторов. По линейности определяются операторы $N^{\rm free}_T(t)$ для любых $T\in\mathcal{T}(\mathcal{H}_1)$. Обозначим через $W^{\rm tr}_{\varepsilon,\hat n,T_1,\omega_1,\dots,T_n,\omega_n}(t_1,\dots,t_n)$ усечённую корреляционную функцию операторов $N_{T_1,\omega_1,\varepsilon}(t_1),\dots,N_{T_n,\omega_n,\varepsilon}(t_n)$ по состоянию $\varrho_{\varepsilon\hat n}$.

Теорема 2 *Пусть $T_i\in\mathcal{T}(\mathcal{H}_1)$ $(i=1,\dots,n)$. Тогда в смысле обобщенных функций по $t_1,\dots,t_n$ в $S'(\mathbb{R}^n)$*

$$\lim_{\varepsilon\to 0} W^{\rm tr}_{\varepsilon,\hat n,T_1,0,\dots,T_n,0}(t_1,\dots,t_n) = \phi_{\hat n}(N^{\rm free}_{T_1}(t_1)\dots N^{\rm free}_{T_n}(t_n))$$

Теорема 2 выражает усеченные корреляционные функции операторов вида $N_{T_i,0,\varepsilon}(t_i)$ в пределе малой плотности через корреляционные функции операторов $N^{\rm free}_{T_i}(t_i)$. Явный вид усечённых корреляционных функций при $\varepsilon\to +0$ для $N_{T_i,\omega_i,\varepsilon}(t_i)$ с произвольными $\omega_i\in\Omega$ дается следующей теоремой.

Теорема 3 *Пусть $T_i\in\mathcal{T}(\mathcal{H}_1)$ и $\omega_i\in\mathbb{R}$ $(i=1,\dots,n)$. Положим $\tilde\omega_k=\omega_n+\dots+\omega_k$ для $k=1,2,\dots,n$. Тогда в смысле обобщенных функций по переменным $t_1,\dots,t_n$ в $S'(\mathbb{R}^n)$*

$$\lim_{\varepsilon\to 0} W^{\rm tr}_{\varepsilon,\hat n,T_1,\omega_1,\dots,T_n,\omega_n}(t_1,\dots,t_n) = (2\pi)^{n-1}\delta(t_2-t_1)\dots\delta(t_n-t_{n-1}) \\ \times\delta_{\tilde\omega_1,0}\int {\rm d}E\,{\rm Tr}[P_E\hat n T_1 P_{E+\tilde\omega_2}T_2\dots T_{n-1}P_{E+\tilde\omega_n}T_n]$$

Таким образом, установлена связь теории свободной вероятности с динамикой открытых квантовых систем в пределе малой плотности. Для полноты изложения приведем уравнение для оператора U_t, описывающего динамику полной системы в пределе малой плотности[8].

Теорема 4 *Оператор эволюции U_t в пределе малой плотности удовлетворяет квантовому стохастическому дифференциальному уравнению*

$${\rm d}U_t = {\rm d}N_t(S-\mathbb{I})U_t$$

где N_t — квантовый процесс Пуассона и S — S-матрица для взаимодействия пробной частицы с одной частицей газа.

[8] Pechen A. N. Quantum stochastic equation for a test particle interacting with a dilute Bose gas // J. Math. Phys. 2004. T. 45. C. 400–417.

В **главе 2** рассматривается некогерентное управление открытыми квантовыми системами с использованием состояния резервуара (его температуры, давления и, наиболее обще, его функции распределения) в качестве управляющего воздействия, предложенное в работе [2]. Для моделирования динамики системы под влиянием управления используются мастер-уравнения, возникающие в режимах слабой связи и малой плотности:

$$\frac{d\rho_t}{dt} = -\mathrm{i}[H_0 + Vf(t), \rho_t] + \mathcal{L}_{n_{\mathbf{k},\alpha}(t)}(\rho_t) \tag{3}$$

где V — оператор взаимодействия системы с когерентным управлением $f(t) \in \mathcal{U} = L^2([0,T];\mathbb{R})$, $T \geq 0$ — финальное время и $\mathcal{L}_{n_{\mathbf{k},\alpha}(t)}$ — действующий на ρ супероператор, который в случае марковского резервуара имеет вид Горини-Коссаковского-Сударшана-Линдблада (ГКСЛ)

$$\mathcal{L}_{n_{\mathbf{k},\alpha}(t)}(\rho) = \sum_i (2L_i\rho L_i^\dagger - L_i^\dagger L_i \rho - \rho L_i^\dagger L_i)$$

Здесь L_i — некоторые линейные операторы в $\mathcal{H}_{\mathrm{S}}$, зависящие от гамильтониана взаимодействия между системой и резервуаром и от состояния резервуара, определяемого функцией $n_{\mathbf{k},\alpha}(t)$ распределения частиц резервуара по их степеням свободы в момент времени t. Степени свободы частиц резервуара нумеруются импульсом $\mathbf{k}$ и дополнительными квантовыми числами α. Для резервуара, являющегося некогерентным излучением, α обозначает поляризацию фотонов; для резервуара, являющегося квантовым газом — внутренние степени свободы атомов либо молекул газа. Функция $n_{\mathbf{k},\alpha}(t) \geq 0$ является некогерентным управлением и принадлежит некоторому множеству допустимых управлений $\mathcal{D}$. В дальнейшем часто будет использоваться зависимость состояния резервуара только от $\omega = |\mathbf{k}|$. Соответствующая функция распределения частиц резервуара по модулю импульса (для некогерентного излучения — спектральная плотность) будет обозначаться как $n_\omega(t)$.

Решение уравнения (3) может быть представлено семейством вполне положительных сохраняющих след отображений $(P_t\{f, n_{\mathbf{k},\alpha}\})|_{t\geq 0}$, называемых отображениями Крауса, как $\rho_t \equiv \rho_t(f, n_{\mathbf{k},\alpha}) = P_t\{f, n_{\mathbf{k},\alpha}\}\rho_0$. Важные задачи управления описываются следующими целевыми функционалами [6]:

$$\begin{aligned}
\mathscr{F}_{O_{\text{target}}}(f, n_{\mathbf{k},\alpha}) &= \operatorname{Tr}[\rho_T(f, n_{\mathbf{k},\alpha}) O_{\text{target}}] \to \min / \max \\
\mathscr{F}_{\rho_{\text{target}}}(f, n_{\mathbf{k},\alpha}) &= \|\rho_T(f, n_{\mathbf{k},\alpha}) - \rho_{\text{target}}\| \to \min \\
\mathscr{F}_{P_{\text{target}}}(f, n_{\mathbf{k},\alpha}) &= \|P_t\{f, n_{\mathbf{k},\alpha}\} - P_{\text{target}}\| \to \min
\end{aligned}$$

Здесь O_{target}, ρ_{target} и P_{target} — целевые наблюдаемая, состояние и вполне положительное отображение, $\|\cdot\|$ обозначает подходящую операторную норму, которая может зависеть от задачи. Первый функционал описывает задачу оптимизации среднего значения наблюдаемой O_{target} в момент времени T, например, задачу переноса населенности из начального состояния $|\psi_{\rm i}\rangle$ в заданное конечное состояние $|\psi_{\rm f}\rangle$ (чему соответствуют $\rho_0 = |\psi_{\rm i}\rangle\langle\psi_{\rm i}|$ и $O_{\text{target}} = |\psi_{\rm f}\rangle\langle\psi_{\rm f}|$). Второй функционал описывает задачу перевода начального состояния ρ_0 в заданную матрицу плотности ρ_{target}. Третий — синтез заданной эволюции P_{target}. Важным примером третьей задачи является генерация квантовых логических элементов, например: квантовой операции Адамара $U_{\mathbb{H}}$, операции C-NOT $U_{\text{C-NOT}}$, вентиля Тоффоли U_{Toffoli}[9]. В этих случаях $P_{\text{target}} = U_{\mathbb{H}}$, $P_{\text{target}} = U_{\text{C-NOT}}$, $P_{\text{target}} = U_{\text{Toffoli}}$, где $U_{\mathbb{H}}$, $U_{\text{C-NOT}}$ и U_{Toffoli} обозначают унитарные операторы, соответствующие этим квантовым операциям. Если управляемая система изолирована от окружения и, соответственно, некогерентное управление отсутствует, то ее эволюция описывается унитарным оператором U_t^f и задача синтеза заданной квантовой операции $P_{\text{target}} = W \in SU(n)$ может быть сформулирована как

$$\mathscr{F}_W(f) = \frac{1}{n^2} |\operatorname{Tr}(W^\dagger U_T^f)|^2 \to \max$$

Максимум данного целевого функционала (равный в выбранной нормировке единице для полностью управляемой системы) достигается при $U_T^f = e^{i\phi} W$, то есть когда оператор эволюции в момент времени T совпадает с точностью до физически несущественного фазового множителя с заданным унитарным оператором W.

[9] Китаев А., Шень А., Вялый М. Классические и квантовые вычисления. — М.: МЦНМО, 1999. Валиев К. А., Кокин А. А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. — Ижевск: РХД, 2004.

В разделе 2.3 изложен метод некогерентного управления [2]. В разделе 2.4 определяются и исследуются универсально оптимальные управления и универсально оптимальные отображения Крауса, то есть такие отображения Крауса $\Phi_{\rho_{\rm f}}$, что $\Phi_{\rho_{\rm f}}(\rho) = \rho_{\rm f}$ для всех $\rho \in \mathcal{D}_n$ [5, 10]. В разделах 2.5 и 2.6 метод некогерентного управления применяется для минимизации функционалов $\mathscr{F}_{\rho_{\rm target}}(f, n_\omega)$ с помощью генетических алгоритмов при $f(t) = 0$, то есть при отсутствии когерентного управления. Изучаются два физически важных класса задач — управление с помощью некогерентного излучения и управление посредством столкновений.

В разделе 2.7 в рамках изучения управляемости открытых квантовых систем изложен метод, позволяющий приближенно создавать произвольные матрицы плотности [19]. В качестве некогерентного управления рассматривается некогерентное излучение спектральной плотности n_ω. Соответствующий ГКСЛ-супероператор имеет вид

$$\mathcal{L}_{n_\omega}(\rho) = \sum_{i<j} A_{ij} \left[(n_{\omega_{ij}} + 1) L_{Q_{ij}}(\rho) + n_{\omega_{ij}} L_{Q_{ji}}(\rho)\right]$$

где $A_{ij} \geq 0$ — коэффициенты Эйнштейна для спонтанного излучения, $\omega_{ij} = \varepsilon_i - \varepsilon_j$ — частоты перехода в системе, $Q_{ij} = |i\rangle\langle j|$ — оператор перехода $|j\rangle \to |i\rangle$ и $L_Q(\rho) = 2Q\rho Q^\dagger - Q^\dagger Q\rho - \rho Q^\dagger Q$. Для широкого класса квантовых систем (случай общего положения) строится схема управления с использованием когерентного и некогерентного управлений, позволяющая приближенно создавать любую невырожденную матрицу плотности в $\mathcal{D}_n$ [19]. Поскольку множество невырожденных матриц плотности плотно в $\mathcal{D}_n$, такая схема позволяет приближенно создавать любые чистые и смешанные матрицы плотности. Пусть $\rho_{\rm f} = \sum_i p_i P_i$ — невырожденная (так что $p_i \neq p_j$ при $i \neq j$) матрица плотности, в которую требуется перевести начальное состояние. Схема управления включает два этапа. На первом этапе применяется некогерентное воздействие с функцией распределения $n_{\omega_{ij}} = p_j/(p_i - p_j)$. Такое воздействие создает матрицу плотности $\tilde{\rho}_{\rm f} = \sum p_i |i\rangle\langle i|$, где $|i\rangle$ есть собственные векторы H_0. На втором этапе применяется когерентное управление, реализующее унитарный оператор, переводящий базис $\{|i\rangle\}$ в базис $\{|\phi_i\rangle\}$. В результате система переходит в состояние ρ_{f}. Таким образом, справедливо следующее утверждение.

Преложение 1 *Пусть $\omega_{ij} \neq \omega_{kl}$ при $(ij) \neq (kl)$, все $A_{ij} > 0$, система унитарно управляема за время T_U (то есть при $\mathcal{L} = 0$ любой оператор $U \in SU(n)$ можно создать за время $t \leq T_U$ с помощью допустимых когерентных управлений) и на временной шкале T_U эффекты декогеренции пренебрежимы, так что можно пренебречь $\mathcal{L}$. Тогда для любой матрицы плотности $\rho_{\mathrm{f}} \in \mathcal{D}_n$ и любого $\varepsilon > 0$ существуют время $T > 0$ и такие управления n_ω и f, что вышеприведенная схема переводит начальную матрицу плотности ρ_0 в матрицу плотности $\rho_T = P_T\{f, n_\omega\}\rho_0$, для которой $\|\rho_T - \rho_{\mathrm{f}}\| \leq \varepsilon$.*

Пример применения метода к созданию смешанной матрицы плотности атома кальция приведен в разделе 2.8. Данный результат является важным вкладом в теорию управляемости квантовых систем на множестве всех матриц плотности.

В **главе 3** изучается некогерентное управление открытыми квантовыми системами с использованием квантовых измерений в качестве управляющего воздействия. Изложение следует работам [3, 4, 9]. Сначала дается общее введение в проблему. Затем приводится общая формулировка управления с помощью неселективных квантовых измерений, то есть измерений, при которых не происходит считывание результата измерения с измерительного прибора и, соответственно, результаты измерения не используются. Неселективное измерение наблюдаемой Q (эрмитова оператора) со спектральным разложением $Q = \sum_i q_i P_i$ (q_i и P_i — собственное значение и проектор) преобразует начальную матрицу плотности системы ρ_0 в $\rho_1 = \mathcal{M}_Q(\rho_0) = \sum_i P_i \rho_0 P_i$. Пусть в моменты времени $t_1, \ldots, t_N$ производится измерение наблюдаемых $Q_1, \ldots, Q_N$, а между измерениями эволюция системы унитарна. Обозначим $U_i := U_{t_i, t_{i+1}}$ — соответствующий унитарный оператор эволюции и $\mathcal{U}_i(\rho) = U_i \rho U_i^\dagger$. Последовательное измерение наблюдаемых Q_1, Q_2, $\ldots$, Q_N переводит ρ_0 в $\rho_T = \mathcal{M}_{Q_N}\mathcal{U}_N \ldots \mathcal{M}_{Q_1}\mathcal{U}_1(\rho_0)$. Изучается задача максимизации функционалов вида

$$\mathscr{F}_O[Q_1, \ldots, Q_N] = \mathrm{Tr}[\rho_N O] \tag{4}$$

по $Q_1, \ldots, Q_N$. Обозначим $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — вектор матриц Паули.

Теорема 5 *Пусть* $n = 2$, $\widetilde{\rho}_T = \mathcal{U}_{[0,T]}(\rho_0)$, $\mathbf{a} = \mathrm{Tr}[\widetilde{\rho}_T \cdot \boldsymbol{\sigma}]$, $\lambda_0 = \mathrm{Tr}\, O$, $\boldsymbol{\lambda} = \mathrm{Tr}[O \cdot \boldsymbol{\sigma}]$ *и* $\Delta\varphi = \angle(\mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda})$. *Тогда*

$$\max_{Q_1,\ldots,Q_n} \mathscr{F}_O[Q_1, \ldots, Q_n] = \lambda_0 + |\boldsymbol{\lambda}||\mathbf{a}| \left[\cos \frac{\Delta\varphi}{n+1}\right]^{n+1}$$

Этот результат получен в работе [3], где также найдены явные выражения для оптимальных измеряемых наблюдаемых $Q_1, \ldots, Q_N$ и получена оптимальная аппроксимация динамического квантового эффекта Зенона.

В разделе 3.3 исследуется возможность использования квантовых измерений для управления квантовыми системами с динамической симметрией. Системы с динамической симметрией подробно обсуждаются в литературе[10]. Изложение следует работам [9, 4]. Решена задача управления трехуровневой квантовой системой с динамической симметрией посредством когерентного управления и одного неселективного измерения [9]. Свободный гамильтониан, гамильтониан взаимодействия и начальное состояние системы имеют вид

$$H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \qquad V = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad |\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

Известно, что если данная система управляется только с помощью когерентного управления f, то при отсутствии измерений $\max\limits_f \mathscr{F}_{1\to 2}(f) = 1/2$. Невозможность переноса более 50% населенности с нижнего уровня на средний является следствием динамической симметрии системы. Пусть теперь на систему воздействует когерентное управление и в некоторый промежуточный момент времени $t_1 \in (0, T)$ проводится неселективное измерение населенности основного уровня, то есть неселективное измерение наблюдаемой $O = P_1$. В качестве управляющих параметров рассматриваются t_1 и частоты Раби Ω_1 и Ω_2 лазерного импульса f в течение интервалов $[0, t_1)$ и $(t_1, T]$. Важный вопрос, можно ли и если да, то насколько, увеличить перенос населенности с

[10] Малкин И. А., Манько В. И. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. — М.: Наука, 1979.

нижнего уровня на средний с использованием как дополнительного воздействия лишь одного неселективного измерения основного состояния. Численно было показано, что в такой схеме удается увеличить вероятность перехода примерно до 67% [4]. Аналитическое решение получено в [9] и дается следующей теоремой.

Теорема 6 *Для системы (5)*

$$\max_{\Omega_1,\Omega_2,t_1} \mathscr{F}_{1\to 2}[f,t_1] = 4\cdot 10^{-3}\left(\sqrt{393-48\sqrt{6}}+138+7\sqrt{6}\right)\approx 0.687$$

Кроме того, в разделе 3.3 явно найдены частоты Раби оптимального импульса. Данный результат показывает, что даже одно неселективное измерение может существенно влиять на степень управления квантовыми системами, увеличивая вероятность перехода с 50% до примерно 68.7%, как в этом случае.

В **главе 4** изучаются экстремумы целевых функционалов для замкнутых квантовых систем. Изложение следует работам [17, 20, 21]. В лабораторных условиях поиск оптимальных управлений часто производится с использованием различных алгоритмов, среди которых важное место занимают алгоритмы локального поиска. В то время как требуется найти глобальный оптимум задачи, такие алгоритмы могут остановиться в каком-либо из локальных оптимумов, которому может соответствовать значение целевого функционала, далекое от глобального оптимума. Количество и свойства локальных оптимумов, такие как их области притяжения, определяют уровень эффективности локальных алгоритмов, что определяет практическую важность задачи исследования локальных оптимумов.

Эволюция замкнутой квантовой системы под воздействием когерентного управления задается уравнением Шредингера

$$\frac{dU_t^f}{dt} = -\mathrm{i}(H_0 + Vf(t))U_t^f$$

Рассматриваются целевые функционалы вида $\mathscr{F}(f) = \mathcal{F}(U_T^f)$, где $\mathcal{F} : U(n) \to \mathbb{R}$ — функция на унитарной группе, которая предполагается инвариантной относительно преобразований $U \to e^{i\phi}U$, что отражает физическую эквивалентность унитарных операторов, отличающихся фазовым множителем. Задаче переноса населенности соответствует целевой функционал $\mathscr{F}_{\mathrm{i}\to\mathrm{f}}(f) = |\langle\psi_{\mathrm{f}}|U_T^f|\psi_{\mathrm{i}}\rangle|^2$, максимизации среднего значения наблюдаемой O соответствует целевой функционал $\mathscr{F}_O(f) = \mathrm{Tr}[U_T^f\rho_0 U_T^{f\dagger}O]$.

В разделе 4.1 даются определения динамического и кинематического ландшафтов управления, регулярных управлений, ловушек и ловушек второго порядка. Ландшафтом управления называется график целевого функционала $\mathscr{F}$. Критической точкой ландшафта называется точка, в которой $\mathrm{grad}\mathscr{F}_f = 0$. Ловушкой для задачи максимизации (соответственно, минимизации) целевого функционала $\mathscr{F}$ называется критическая точка, являющаяся локальным, но не глобальным максимумом (соответственно, минимумом) $\mathscr{F}$. Кинематическим ландшафтом называется график функции $\mathcal{F}(U)$. Регулярным управлением называется управление, в котором якобиан отображения $f \to U_T^f$ невырожден. В разделе 4.2 приводятся явные выражения для градиентов и гессианов целевых функционалов рассматриваемых в работе задач.

В разделе 4.4 рассматриваются ландшафты управления для двухуровневой квантовой системы Ландау-Зинера, для которой доказывается отсутствие ловушек [21]. Эволюция системы Ландау-Зинера описывается уравнением

$$\frac{dU_t^f}{dt} = -\mathrm{i}(\sigma_x + f(t)\sigma_z)U_t^f, \qquad U_{t=0}^f = \mathbb{I}$$

Система Ландау-Зинера широко применяется в физике, химии и биохимии, в том числе для описания кубитов — элементарных логических элементов для квантовых вычислений[11]. В этом случае функционалы $\mathscr{F}_{\mathrm{i}\to\mathrm{f}}(f)$ и $\mathscr{F}_W(f)$ описывают задачи оптимального синтеза заданного состояния кубита и заданного однокубитного квантового вентиля.

Теорема 7 *Пусть $\mathscr{F}(f) = \mathcal{F}(U_T^f)$, где $\mathcal{F} : U(2) \to \mathbb{R}$ — дважды дифференцируемая функция на унитарной группе, все максимумы которой глобальные, и пусть $T \geq \pi$. Тогда для системы Ландау-Зинера все максимумы $\mathscr{F}(f)$ также глобальные.*

[11] Покровский В. Л. Ландау и современная физика // Успехи физических наук. 2009. Т. 179(11). С. 1237–1244.

Важным результатом является следующее утверждение.

Теорема 8 *Экстремумами функционалов $\mathscr{F}_O(f)$ [и, следовательно, также $\mathscr{F}_{\mathrm{i}\to\mathrm{f}}(f)$] и $\mathscr{F}_W(f)$ для двухуровневой системы Ландау-Зинера при $T \geq \pi$ являются только глобальные максимумы и глобальные минимумы.*

Таким образом, показано, что широкий класс важных для приложений целевых функционалов для двухуровневой системы Ландау-Зинера не имеет ловушек. Данный результат является первым полным доказательством отсутствия ловушек для конечноуровневых квантовых систем.

В разделе 4.5 исследуется влияние шумов в оптимальном управлении. При наличии шума $\xi(t)$ реальное управление $f(t)$ флуктуирует около оптимального управления f_0 как $f(t) = f_0(t) + \varrho(t)\xi(t)$, где $\varrho(t) = 1$ для аддитивного шума и $\varrho(t) = f_0(t)$ для мультипликативного шума. Рассматриваются аддитивный (AWN) и мультипликативный (MWN) белый шум интенсивности $\sigma > 0$ с автокорреляционной функцией $\mathbb{E}[\xi(t)\xi(t')] = \sigma\delta(t-t')$. Пусть $E = \int_0^T |f_0(t)|^2 dt$ — полная энергия оптимального импульса.

Теорема 9 *Пусть $\mathscr{F} = \mathscr{F}_{\mathrm{i}\to\mathrm{f}}$ либо $\mathscr{F} = \mathscr{F}_W$. Тогда при $\sigma \to 0$ (далее $\alpha = \mathrm{i}\to\mathrm{f}$ или $\alpha = W$):*

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[\mathscr{F}_\alpha(f_0+\xi)] &= \mathscr{F}_\alpha(f_0) - \sigma^2\mathcal{D}^\alpha_{\mathrm{AWN}}(f_0,T) + o(\sigma^2) \\
\mathbb{E}[\mathscr{F}_\alpha(f_0(1+\xi))] &= \mathscr{F}_\alpha(f_0) - \sigma^2\mathcal{D}^\alpha_{\mathrm{MWN}}(f_0,T) + o(\sigma^2)
\end{aligned}$$

и справедливы оценки

$$\begin{aligned}
0 \leq \mathcal{D}^{\mathrm{i}\to\mathrm{f}}_{\mathrm{AWN}}(f_0,T) &\leq T, \qquad \mathcal{D}^W_{\mathrm{AWN}}(f_0,T) = T \\
0 \leq \mathcal{D}^{\mathrm{i}\to\mathrm{f}}_{\mathrm{MWN}}(f_0,T) &\leq E, \qquad \mathcal{D}^W_{\mathrm{MWN}}(f_0,T) = E
\end{aligned}$$

Данный результат показывает, что влияние аддитивного белого шума можно минимизировать, выбрав наиболее короткие оптимальные импульсы, а мультипликативного — выбирая импульсы наименьшей энергии [21].

Особую важность имеет задача изучения ландшафтов управления для многоуровневых систем. В разделе 4.6 приводится основной результат для систем с числом уровней $n \geq 3$. Для таких систем локальные свойства целевых функционалов существенно сложнее. Вводится понятие ловушки второго порядка — критического управления $f(t)$, не являющегося глобальным максимумом, для которого гессиан целевого функционала $H_f = \delta^2\mathscr{F}/\delta f^2$ отрицательно полуопределен, $H_f \leq 0$ (для задачи максимизации $\mathscr{F}$). Ловушки второго порядка не обязательно являются локальными максимумами, так как в окрестности такой ловушки целевой функционал может расти в направлениях, соответствующих нулевым собственным значениям гессиана. В то же время они являются ловушками для широко применяемых алгоритмов, использующих информацию не более чем первого и второго порядка, то есть использующих только градиент и гессиан целевого функционала. Основным результатом является следующая теорема [17].

Теорема 10 *Постоянное управление $f(t) = f_* = \mathrm{const}$ является ловушкой второго порядка для целевого функционала $\mathscr{F}_O(f)$, если в терминах спектрального разложения $\tilde{H}_0 = H_0 + Vf_* = \sum_{i=1}^n \tilde{h}_i|\tilde{e}_i\rangle\langle\tilde{e}_i|$ начальная матрица плотности и целевой оператор имеют вид $\rho_0 = |\tilde{e}_k\rangle\langle\tilde{e}_k|$ и $O = \sum_{i=1}^n \lambda_i|\tilde{e}_i\rangle\langle\tilde{e}_i|$, где $1 < k < n$, $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_n$, и оператор взаимодействия удовлетворяет $\langle\tilde{e}_i|V|\tilde{e}_k\rangle = 0$ для всех $i < k$.*

Данный результат доказан в [17]. Содержащимся в формулировке теоремы критериям удовлетворяют такие важные для приложений физические системы, как, например, трехуровневая Λ-система. В то же время в разделе 4.7 показано, что для Λ-систем найденные ловушки второго порядка не являются локальными максимумами [20].

В разделе 4.8 исследуется задача управления коэффициентом прохождения частицы энергии E через барьер. Управлением является форма потенциала $V(x)$, целевым функционалом — коэффициент прохождения $T_E[V]$ через барьер. Рассматриваются потенциалы $V \in L^1(\mathbb{R})$ с компактным носителем. Кинематический ландшафт определяется коэффициентом прохождения $T(M)$ как функцией оператора монодромии $M \in SU(1,1)$. Изложение следует работе [22], в которой доказан следующий основной результат.

Теорема 11 *Все экстремумы коэффициента прохождения как функции $T(M)$ на $SU(1,1)$ — глобальные максимумы. Все экстремумы коэффициента прохождения как функционала $T_E[V]$ — глобальные максимумы.*

Отметим, что данный результат является первым и единственным на сегодняшний день доказательством отсутствия ловушек для бесконечноуровневых квантовых систем.

Таким образом, в главе 4 показано, что широкий класс систем, включающий важные для приложений системы с числом уровней более двух, имеет ловушки второго порядка, в то время как задача управления коэффициентом прохождения частицы через потенциальный барьер и задача максимизации наблюдаемой в системе Ландау-Зинера не имеют ловушек.

В **главе 5** изучаются экстремумы целевых функционалов $\mathscr{F}_O$ для открытых квантовых систем с использованием кинематического описания [7, 8, 11, 13]. Действие $P_t\{f, n_{\mathbf{k},\alpha}\}$ на ρ_0 можно представить в виде

$$P_t\{f, n_{\mathbf{k},\alpha}\}\rho_0 = \sum_{i=1}^{\lambda} K_i\{t; f, n_{\mathbf{k},\alpha}\}\rho_0 K_i^\dagger\{t; f, n_{\mathbf{k},\alpha}\} \qquad (6)$$

где $K_i\{t; f, n_{\mathbf{k},\alpha}\} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ — операторы Крауса. Операторы Крауса удовлетворяют соотношению

$$\sum_{i=1}^{\lambda} K_i^\dagger\{t; f, n_{\mathbf{k},\alpha}\} K_i\{t; f, n_{\mathbf{k},\alpha}\} = \mathbb{I}$$

и, следовательно, каждое семейство операторов Крауса может быть отождествлено с точкой комплексного многообразия Штифеля $V_n(\mathbb{C}^{n\lambda})$. Представление отображения $P_t\{f, n_{\mathbf{k},\alpha}\}$ в виде (6) неединственно. Существует класс эквивалентных представлений, который определяет некоторое отношение эквивалентности $\sim$ на многообразии Штифеля. Таким образом, существует взаимнооднозначное отображение множества всех отображений Крауса на фактор-множество $S_n := V_n(\mathbb{C}^{n\lambda})/\sim$.

Если для данной физической системы любое отображение Крауса Φ может быть реализовано как $\Phi = P_T\{f, n_{\mathbf{k},\alpha}\}$ с помощью некоторого управления $\{f, n_{\mathbf{k},\alpha}\}$, то используется кинематическое описание управляемой системы, в котором целевые функционалы принимают вид функций на $V_n(\mathbb{C}^{n\lambda})$ или на S_n (для анализа ловушек несущественно, какое из пространств выбирать):

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_O[K_1,\dots,K_\lambda] &= \mathrm{Tr}\Big(\sum_{i=1}^{\lambda} K_i\rho K_i^\dagger O\Big)\\
\mathcal{F}_{\rho_{\mathrm{target}}}[K_1,\dots,K_\lambda] &= \Big\|\sum_{i=1}^{\lambda} K_i\rho K_i^\dagger - \rho_{\mathrm{target}}\Big\|\\
\mathcal{F}_{P_{\mathrm{target}}}[K_1,\dots,K_\lambda] &= \Big\|P_{\{K_i\}} - P_{\mathrm{target}}\Big\|
\end{aligned}$$

Здесь $P_{\{K_i\}}(\rho) = \sum_i K_i\rho K_i^\dagger$. Кинематическим ландшафтом задачи $\mathscr{F}_\alpha$ для открытой квантовой называется график функции $\mathcal{F}_\alpha$ ($\alpha = O, \rho_{\mathrm{target}}, P_{\mathrm{target}}$). Регулярным называется управление $\{f, n_{\mathbf{k},\alpha}\}$, в котором невырожден якобиан отображения $\chi : \mathcal{U}\times\mathcal{D}\to S_n$, ставящего в соответствие управлению $(f, n_{\mathbf{k},\alpha})\in\mathcal{U}\times\mathcal{D}$ точку S_n, соответствующую вполне положительному отображению $P_T\{f, n_{\mathbf{k},\alpha}\}$. В разделе 5.2 исследуются экстремумы целевых функций $\mathcal{F}_O$ в кинематическом описании.

Теорема 12 *Для любых $\rho_0\in\mathcal{D}_2$ и эрмитовой матрицы $O\in\mathbb{C}^{2\times 2}$ экстремумами кинематического ландшафта $\mathcal{F}_O[K_1,\dots,K_\lambda] = \mathrm{Tr}[(\sum_{i=1}^{\lambda} K_i\rho_0 K_i^\dagger)O]$ на многообразии Штифеля $V_2(\mathbb{C}^8)$ являются только глобальные минимумы, глобальные максимумы и седловые точки.*

Также в разделе 5.2 явно описаны все множества глобальных минимумов и максимумов и седловые множества ландшафта $\mathcal{F}_O$ для этой системы при любых ρ_0. Теорема 12 доказана в [7], обобщение для произвольных n получено в [8] и содержится в разделе 5.3. Этот результат может рассматриваться как продолжение работ фон Неймана, Брокета, Рабица и других по исследованию экстремумов следовых функций на унитарных группах на следовые функции на многообразиях Штифеля. В разделе 5.4 выводится единое описание кинематических ландшафтов управления открытыми классическими и квантовыми системами и дается доказательство отсутствия ловушек на основе выпуклости множества всех состояний и выпуклости вверх типичных целевых функций. Важным практическим следствием этого результата является отсутствие ловушек в регулярных управлениях динамического ландшафта для открытых квантовых систем, что получило применение при анализе управления с обратной связью [12] и при построении теорий OptiChem[12] и OptiEvo[13], позволяющих исследовать задачи оптимизации в химии и биологии.

Заключение содержит итоги диссертационной работы.

Публикации автора по теме диссертации

[1] Pechen, A. The multi-time correlation functions, free white noise, and the generalized Poisson statistics in the low density limit // J. Math. Phys. — 2006. — T. 47. — C. 033507.

[2] Pechen, A., Rabitz, H. Teaching the environment to control quantum systems // Phys. Rev. A. — 2006. — T. 73. — C. 062102.

[3] Pechen, A., Il'in, N., Shuang, F., Rabitz, H. Quantum control by von Neumann measurements // Phys. Rev. A. — 2006. — T. 74. — C. 052102.

[4] Shuang, F., Pechen, A., Ho, T.-S., Rabitz, H. Observation-assisted optimal control of quantum dynamics // J. Chem. Phys. — 2007. — T. 126. — C. 134303.

[5] Wu, R., Pechen, A., Brif, C., Rabitz, H. Controllability of open quantum systems with Kraus-map dynamics // J. Phys. A: Math. Theor. — 2007. — T. 40. — C. 5681–5693.

[6] Печень, А. Н., Рабиц, Х. Некогерентное управление открытыми квантовыми системами // Вестник Самарского государственного университета. Естественнонаучная секция. — 2008. — Т. 8. — № 1. — С. 641–658.

[7] Pechen, A., Prokhorenko, D., Wu, R., Rabitz, H. Control landscapes for two-level open quantum systems // J. Phys. A: Math. Theor. — 2008. — T. 41. — C. 045205.

[12] Moore K. W., Pechen A., Feng X.-X., Dominy J., Beltrani V., Rabitz H. Why is chemical synthesis and property optimization easier than expected? // Phys. Chem. Chem. Phys. 2011. T. 13. C. 10048–10070.

[13] Feng, X.-J. Pechen A., Jha A., Wu R., Rabitz H. Global optimality of fitness landscapes in evolution // Chemical Science. 2012. T. 3. C. 900–906.

[8] Wu, R., Pechen, A., Rabitz, H., Hsieh, M., Tsou, B. Control landscapes for observable preparation with open quantum systems // J. Math. Phys. — 2008. — Т. 49. — С. 022108.

[9] Shuang, F., Zhou, M., Pechen, A., Wu, R., Shir, O. M., Rabitz, H. Control of quantum dynamics by optimized measurements // Phys. Rev. A. — 2008. — Т. 78. — С. 063422.

[10] Печень, А. Н., Рабиц, Х. Некогерентное управление открытыми квантовыми системами // Современная математика. Фундаментальные направления. — 2011. — Т. 42. — С. 179–185.

[11] Oza, A., Pechen, A., Dominy, J., Beltrani, V., Moore, K., Rabitz, H. Optimization search effort over the control landscapes for open quantum systems with Kraus-map evolution // J. Phys. A: Math. Theor. — 2009. — Т. 42. — С. 205305.

[12] Pechen, A., Brif, C., Wu, R., Chakrabarti, R., Rabitz, H. General unifying features of controlled quantum phenomena // Phys. Rev. A. — 2010. — Т. 82. — С. 030101(R).

[13] Pechen, A., Rabitz, H. Unified analysis of terminal-time control in classical and quantum systems // Europhysics Letters. — 2010. — Т. 91. — С. 60005.

[14] Moore, K. W., Pechen, A., Feng, X.-X., Dominy, J., Beltrani, V., Rabitz H. Universal characteristics of chemical synthesis and property optimization // Chemical Science. — 2011. — Т. 2. — С. 417–424.

[15] Moore, K. W., Pechen, A., Feng, X.-X., Dominy, J., Beltrani, V., Rabitz, H. Why is chemical synthesis and property optimization easier than expected? // Phys. Chem. Chem. Phys. — 2011. — Т. 13. — С. 10048–10070.

[16] Печень, А. Н. Некоторые вопросы динамики и управления открытыми квантовыми системами // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия “Физико-математические науки”. — 2011. — Т. 2. — № 23. — С. 151–157.

[17] Pechen, A. N., Tannor, D. J. Are there traps in quantum control landscapes? // Phys. Rev. Lett. — 2011. — T. 106. — C. 120402.

[18] Печень, А. Н. Критические точки целевых функционалов для задач управления квантовыми системами // Вестник Тамбовского государственного университета. — 2011. — Т. 16. — Вып. 4. — С. 1146–1148.

[19] Pechen, A. Engineering arbitrary pure and mixed quantum states // Phys. Rev. A. — 2011. — T. 84. — C. 042106.

[20] Pechen, A. N., Tannor, D. J. Quantum control landscape for a Λ-atom in the vicinity of second order traps // Isr. J. Chem. — 2012. — T. 52. — C. 467–472.

[21] Pechen, A. N., Il'in, N. B. Trap-free manipulation in the Landau-Zener system // Phys. Rev. A. — 2012. — T. 86. — C. 052117.

[22] Pechen, A. N., Tannor, D. J. Control of quantum transmission is trap-free [Электронный ресурс] // Canadian Journal of Chemistry. — 2013. Режим доступа: http://dx.doi.org/10.1139/cjc-2013-0301

Подписано в печать 21.11.2013
Тираж 100 экз.

Отпечатано в Математическом институте им. В.А. Стеклова РАН
Москва, 119991, ул. Губкина, 8