# Квантовые каналы, комплексные многообразия Штифеля и оптимизация

Иван Русских

МФТИ, МИАН

по работе
*I. Russkikh, B. Volkov, A. Pechen. Quantum channels, complex Stiefel manifolds, and optimization. arXiv:2408.09820*
26.08.2024

# Управление открытой квантовой системой

Эволюция открытой $n$-уровневой квантовой системы описывается уравнением:

$$\frac{d\rho_t}{dt} = \mathcal{L}_t \rho_t := -i[H_0 + f(t)V, \rho_t] + \mathcal{D}_t \rho_t, \quad \rho_{t=0} = \rho_0,$$

где $\rho$ — матрица плотности системы, $H_0$ — свободный гамильтониан, $V$ — гамильтониан взаимодействия (эрмитовы матрицы $n \times n$), $f$ — когерентное управление, $\mathcal{D}_t$ — оператор диссипации, который может зависеть от когерентного и некогерентного управления[1], $\rho_0 \in \mathbb{C}^{n \times n}$ — начальная матрица плотности ($\rho_0 = \rho_0^\dagger \geqslant 0$, $\operatorname{Tr} \rho_0 = 1$).

[1] A. Pechen and H. Rabitz. Teaching the environment to control quantum systems. // Phys. Rev. A. 2006. V. 73(6):062102.

# Уравнение ГКСЛ и квантовые каналы

Эволюция открытой системы представляется отображением

$$\Phi_t \colon \mathbb{C}^{n\times n} \to \mathbb{C}^{n\times n},$$
$$\frac{d\Phi_t}{dt} = \mathcal{L}_t \Phi_t, \quad \Phi_{t=0} = \mathrm{Id}_n, \quad \rho_t = \Phi_t(\rho_0).$$

В случае $\mathcal{D}_t\rho = \sum_k \left(2V_k(t)\rho V_k^\dagger(t) - V_k^\dagger(t)V_k(t)\rho - \rho V_k^\dagger(t)V_k(t)\right)$ уравнение эволюции системы становится уравнением Горини — Коссаковского — Сударшана — Линдблада (ГКСЛ).
Если эволюция системы описывается уравнением ГКСЛ, отображение эволюции $\Phi_t$ является квантовым каналом и лежит в множестве квантовых каналов $\mathcal{C}han(n)$.

# Квантовые каналы

- Линейное отображение $\Phi\colon \mathbb{C}^{n\times n} \to \mathbb{C}^{m\times m}$ **положительно**, если из $A \geqslant 0$ следует $\Phi(A) \geqslant 0$.
- $\Phi$ **вполне положительно**, если отображение
$$\Phi \otimes \mathrm{Id}_k\colon \mathbb{C}^{n\times n} \otimes \mathbb{C}^{k\times k} \to \mathbb{C}^{m\times m} \otimes \mathbb{C}^{k\times k}$$
положительно для любого натурального $k$.
- $\Phi$ **сохраняет след**, если для любой $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ выполняется $\mathrm{Tr}(\Phi(A)) = \mathrm{Tr}(A)$.
- $\Phi$ — **квантовый канал**, если это вполне положительное линейное отображение, сохраняющее след (множество квантовых каналов из $\mathbb{C}^{n\times n}$ в $\mathbb{C}^{m\times m}$ будем обозначать $\mathcal{C}han(n, m)$, а если $n = m$, то $\mathcal{C}han(n)$).

# Задача квантового управления

Некоторые типичные задачи квантового управления можно сформулировать как задачи максимизации или минимизации целевого функционала типа Майера $J$ при фиксированном времени управления $T > 0$.

Этот функционал $J \colon \mathcal{F} \to \mathbb{R}$, где $\mathcal{F}$ — множество допустимых управлений, называется **динамическим функционалом**.

В случае управления открытой квантовой системой, эволюция которой описывается уравнением ГКСЛ,

$$J = F(\Phi_T),$$

где $F \colon \mathcal{C}han(n) \to \mathbb{R}$ — **кинематический функционал**.

# Примеры целевых функционалов для открытой системы: максимизация квантовой наблюдаемой

1. Функционал максимизации среднего значения квантовой наблюдаемой $O$ ($O \in \mathbb{C}^{m\times m}$ — эрмитов оператор, $\rho_0 \in \mathbb{C}^{n\times n}$ — матрица плотности начального состояния):

$$F_O(\Phi) := \mathrm{Tr}(O\Phi(\rho_0)), \quad \Phi \in \mathcal{C}han(n, m),$$
$$J_O[f] := F_O(\Phi_T) \to \max .$$

Функционал $F_O$ является аффинным, то есть одновременно выпуклым и вогнутым.

# Примеры целевых функционалов для открытой системы: термодинамические характеристики

2. Пусть $S$ — квантово-механическая функция энтропии.[2] Рассматриваются вогнутые функции энтропии, например, энтропия фон Неймана:

$$S(\rho) = -\operatorname{Tr}(\rho \log \rho) = -\sum_{\lambda_i \neq 0} \lambda_i \log \lambda_i,$$

где $\{\lambda_i\}$ — собственные числа матрицы $\rho$.
Функционал имеет вид ($\beta > 0$)[3]

$$F^S_O(\Phi) = -\operatorname{Tr}(O\Phi(\rho_0)) + \frac{1}{\beta} S(\Phi(\rho_0)), \quad \Phi \in \mathcal{C}han(n,m),$$

$$J^S_O[f] := F^S_O(\Phi_T) \to \min / \max .$$

Функционал $F^S_O$ вогнутый.

[2] Ohya, M., Petz, D.: Quantum Entropy and Its Use. — Springer, Berlin (1993).
[3] Pechen, A.N., Rabitz, H.: Unified analysis of terminal-time control in classical and quantum systems // Europhysics Letters 91, 60005 (2010).

## Примеры целевых функционалов для открытой системы: генерация квантового канала

3. Функционал генерации квантового канала $\Phi_0 \in \mathcal{C}han(n,m)$

$$F_{\Phi_0}(\Phi) := \|\Phi - \Phi_0\|_F^2, \quad \Phi \in \mathcal{C}han(n,m),$$

где $\|\cdot\|_F$ — норма Фробениуса,

$$J_{\Phi_0}[f] := F_{\Phi_0}(\Phi_T^f) \to \min.$$

Частным случаем является функционал генерации квантового вентиля $W \in \mathrm{SU}(n)$, $\Phi_W(\rho) = W\rho W^\dagger$ — соответствующий унитарный квантовый канал.

$$F_W(\Phi) := \|\Phi - \Phi_W\|_F^2, \quad \Phi \in \mathcal{C}han(n),$$
$$J_W[f] := F_W(\Phi_T^f) \to \min.$$

Эти функционалы выпуклы.

# Функционал генерации квантового вентиля, заданный на трёх состояниях

**Теорема (Goerz, Reich, Koch)**

*Пусть* $\{|\phi_l\rangle\}_{l=1}^n$ *— ортонормированный базис в* $\mathbb{C}^n$*,*
$\rho_1 = \sum_{l=1}^n \lambda_l |\phi_l\rangle\langle\phi_l|$ *(*$\lambda_l > 0$*,* $\lambda_i \neq \lambda_j$ *при* $i \neq j$*,* $\sum_{l=1}^n \lambda_l = 1$*),*
$\rho_2$ *— одномерный проектор, такой что* $\rho_2 |\phi_l\rangle \neq 0$ *для* $l = 1, \ldots n$*,*
$\rho_3 = \frac{1}{n}\mathbb{I}_n$*. Тогда если* $\Phi(\rho_k) = W\rho_k W^\dagger$ *для* $k = 1, 2, 3$*, то*
$\Phi(\rho) = W\rho W^\dagger$ *для любой матрицы плотности.* [4]

4. Используя этот факт, можно предложить другой (также выпуклый) функционал для задачи генерации квантового вентиля:

$$F_W^{\mathrm{GRK}}(\Phi) := \frac{1}{6}\sum_{k=1}^{3} \mathrm{Tr}\left[\left(\Phi(\rho_k) - W\rho_k W^\dagger\right)^2\right], \quad \Phi \in \mathcal{C}han(n),$$

$$J_W^{\mathrm{GRK}}[f] := F_W^{\mathrm{GRK}}(\Phi_T^f) \to \min.$$

[4] Goerz M., Reich D., Koch C. Optimal control theory for a unitary operation under dissipative evolution // New J. Phys. 2014. V. 16: 055012.

# Ландшафты задач квантового управления

- **Кинематический ландшафт** — график кинематического функционала $F$.
  **Кинематическая ловушка** — это точка локального, но не глобального минимума для минимизируемого кинематического функционала (или максимума для максимизируемого).
- **Динамический ландшафт** — график динамического функционала $J$.
  **Динамическая ловушка** — это точка локального, но не глобального минимума для минимизируемого динамического функционала (или максимума для максимизируемого)..
- Наличие динамических ловушек сильно замедляет экспериментальный поиск оптимума, поэтому изучение динамического ландшафта важно для практических применений. Исследование кинематического ландшафта требуется для анализа динамического ландшафта.

# Отсутствие ловушек в кинематических ландшафтах для случая замкнутых систем

В случае управления замкнутыми квантовыми системами, динамика которых описывается уравнением Шрёдингера, для кинематических функционалов, заданных на множестве специальных унитарных матриц $\mathrm{SU}(n)$, известно, что локальные, но не глобальные экстремумы отсутствуют.[5,6,7]

[5] von Neumann J. Some matrix-inequalities and metrization of matrix-space // Tomsk Univ. Rev. 1937. V. 1. P. 286–300

[6] Brockett R. Least squares matching problems // Linear Algebra and Its Applications. 1989. V. 122/123/124, P. 761–777.

[7] Rabitz H., Hsieh M., Rosenthal C. Quantum optimally controlled transition landscapes // Science. 2004. V. 303(5666). P. 1998–2001.

# Параметризации квантовых каналов: матрицы Чои

Линейному отображению $\Phi\colon \mathbb{C}^{n\times n} \to \mathbb{C}^{m\times m}$ на пространстве матриц соответствует матрица Чои

$$C_\Phi = \sum_{i,j=1}^{n} E_{ij} \otimes \Phi(E_{ij}),$$

где $E_{ij}$ — матричные единицы, единственный ненулевой элемент $E_{ij}$ — единица на пересечении $i$-ой строчки и $j$-го столбца.

$$C_\Phi = \begin{bmatrix} \Phi(E_{11}) & \dots & \Phi(E_{1n}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi(E_{n1}) & \dots & \Phi(E_{nn}) \end{bmatrix}$$

При этом $\Phi$ вполне положительно тогда и только тогда, когда $C_\Phi \geqslant 0$.[8]

[8] Choi M. Completely positive linear maps on complex matrices // Linear Algebra and its Applications. 1975. V. 10(3). P. 285–290.

# Параметризации квантовых каналов: матрицы Чои

## Определение

Частичным следом $\mathrm{Tr}_1 \colon \mathcal{M}_n \otimes \mathcal{M}_m \to \mathcal{M}_m$ называется функционал, заданный как $\mathrm{Tr}_1(A \otimes B) = \mathrm{Tr}(A)B$ и продолженный линейно на все элементы $\mathcal{M}_n \otimes \mathcal{M}_m$. Аналогично можно определить частичный след по второму пространству: $\mathrm{Tr}_2(A \otimes B) = \mathrm{Tr}(B)A$.

Линейное отображение $\Phi \colon \mathbb{C}^{n\times n} \to \mathbb{C}^{m\times m}$ сохраняет след тогда и только тогда, когда $\mathrm{Tr}_2(C_\Phi) = \mathbb{I}_n$.
Таким образом, $\Phi$ является квантовым каналом тогда и только тогда, когда $C_\Phi \geqslant 0$ и $\mathrm{Tr}_2(C_\Phi) = \mathbb{I}_n$.
Множество матриц Чои всех квантовых каналов образует компактное выпуклое подмножество пространства матриц $\mathbb{C}^{nm\times nm}$. Это множество будеми обозначать $\mathcal{C}hoi(n,m)$. Сопоставление $\Phi \mapsto C_\Phi$ является выпукло-линейным изоморфизмом множеств $\mathcal{C}han(n,m)$ и $\mathcal{C}hoi(n,m)$.

# Параметризации квантовых каналов: разложение Крауса

Любой квантовый канал $\Phi \in \mathcal{C}han(n, m)$ можно представить в следующем виде[9,10]

$$\Phi(\rho) = \sum_{l=1}^{nm} K_l \rho K_l^\dagger, \quad \sum_{l=1}^{nm} K_l^\dagger K_l = \mathbb{I}_n,$$

где $K_l \colon \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^m$ — операторы Крауса.
Разложение Крауса, вообще говоря, неединственно.

[9] Choi M. Completely positive linear maps on complex matrices // Linear Algebra and its Applications. 1975. V. 10(3). P. 285–290.

[10] Kraus K. States, Effects, and Operations. — Berlin: Springer-Verlag, 1983.

# Параметризации квантовых каналов: многообразие Штифеля

Наборы операторов Крауса $(K_1, \ldots, K_{nm})$ однозначно соответствуют точкам комплексного многообразия Штифеля $V_n\left(\mathbb{C}^{nm^2}\right)$.

## Определение

Комплексным многообразием Штифеля называется множество

$$V_k(\mathbb{C}^n) = \{A \in \mathbb{C}^{n \times k} : A^\dagger A = \mathbb{I}_k\}$$

с естественной гладкой структурой, наследуемой из $\mathbb{C}^{n \times k}$.

Если $K = \begin{pmatrix} K_1 \\ \vdots \\ K_{nm} \end{pmatrix}$, то $K^\dagger K = \mathbb{I}_n$, то есть $K$ соответствует точке на многообразии Штифеля

# Действие унитарной группы на многообразии Штифеля

Две точки $(K_1, \ldots, K_{nm})$ и $(\widetilde{K}_1, \ldots, \widetilde{K}_{nm})$ на многообразии Штифеля $V_n(\mathbb{C}^{nm^2})$ соответствуют одному и тому же квантовому каналу тогда и только тогда, когда существует унитарная матрица $U \in \mathrm{U}(nm)$ с элементами $(u_{ij})_{i,j=1}^{nm}$, такая что[11]

$$\widetilde{K}_i = \sum_{j=1}^{nm} u_{ij} K_j.$$

Таким образом, орбиты действия группы $\mathrm{U}(nm)$ однозначно соответствуют квантовым каналам.

[11] Nielsen, M. A., Chuang, I. L. Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition. — Cambridge: Cambridge University Press, 2010.

# Действие унитарной группы на многообразии Штифеля

**Теорема**

*Пространства* $V_n(\mathbb{C}^{nm^2})/\mathrm{U}(nm)$ *и* $\mathcal{C}han(n,m)$ *гомеоморфны. Более того, отображения* $\pi$ *и* $\widetilde{\pi}$ *открыты.*

$$\begin{tikzcd}
 & V_n(\mathbb{C}^{nm^2}) \arrow[dl, "\pi"'] \arrow[dr, "\widetilde{\pi}"] & \\
V_n(\mathbb{C}^{nm^2})/\mathrm{U}(nm) \arrow[rr, "\cong"] & & \mathcal{C}han(n,m)
\end{tikzcd}$$

$\pi$ — отображение факторизации по группе $\mathrm{U}(nm)$, $\widetilde{\pi}$ — отображение сопоставления разложению Крауса соответствующий квантовый канал.

# Структура $\pi^{-1}(\Phi)$

**Теорема**

*Пусть $\Phi$ — квантовый канал, его матрица Чои имеет $C_\Phi$ ранг $k$ $(1 \leqslant k \leqslant nm)$. Тогда $\pi^{-1}(\Phi)$ — вложенное подмногообразие $V_n(\mathbb{C}^{nm^2})$, диффеоморфное комплексному многообразию Штифеля $V_k(\mathbb{C}^{nm})$.*

# Кинематический функционал на многообразии Штифеля

Непрерывный функционал $F$, заданный на множестве квантовых каналов, порождает функционал на многообразии Штифеля по формуле $\widetilde{F} = F \circ \pi$.
Поскольку многообразие Штифеля — гладкое риманово многообразие, для анализа функционалов на нём можно применять методы римановой оптимизации.[12]

[12] 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. V. 42(20): 205305.

# Кинематический функционал на многообразии Штифеля

Для функционала максимизации среднего значения квантовой наблюдаемой $\widetilde{F}_O$ на многообразии Штифеля $V_2(\mathbb{C}^8)$, которое параметризует однокубитные каналы, ранее было строго доказано отсутствие кинематических ловушек с использованием метода множителей Лагранжа.[13]
В случае произвольной размерности отсутствие кинематических ловушек для функционала $\widetilde{F}_O$ было ранее доказано с помощью поднятия квантового канала до унитарной динамики в большем пространстве.[14]

[13] Pechen A., Prokhorenko D., Wu R., Rabitz H. Control landscapes for two-level open quantum systems // J. Phys. A: Math. Theor. 2008. V. 41(4): 045205.

[14] Wu R., Pechen A., Rabitz H., Hsieh M., Tsou B. Control landscapes for observable preparation with open quantum systems // J. Math. Phys. 2008. V. 49(2): 022108.

# Связь между экстремумами на многообразии Штифеля и на множестве матриц Чои

**Теорема**

*$s$ — точка локального экстремума функционала $\widetilde{F}$ на многообразии Штифеля $V_n(\mathbb{C}^{nm^2})$ тогда и только тогда, когда $\pi(s)$ — точка локального экстремума функционала $F$ на множестве квантовых каналов $\mathcal{C}han(n, m)$.*

# Отсутствие ловушек в кинематических ландшафтах в произвольной размерности

**Теорема**

*Пусть* $F\colon \mathcal{C}han(n,m) \to \mathbb{R}$ *— непрерывный выпуклый (вогнутый) функционал. Тогда* $F$ *не имеет точек локального, но не глобального минимума (максимума) на* $\mathcal{C}han(n,m)$, $\widetilde{F}$ *не имеет точек локального, но не глобального минимума (максимума) на* $V_n(\mathbb{C}^{nm^2})$.

В частности, функционал $\widetilde{F}_O$ не имеет точек локального, но не глобального минимума или максимума, $\widetilde{F}_{\Phi_0}$ и $\widetilde{F}_W^{\mathrm{GRK}}$ не имеют точек локального, но не глобального минимума, а $F_O^S$ не имеют точек локального, но не глобального максимума на $V_n(\mathbb{C}^{nm^2})$.

# Заключение

1. Доказано наличие естественного гомеоморфизма между пространством орбит $V_n(\mathbb{C}^{nm^2})/\mathrm{U}(nm)$ и пространством квантовых каналов $\mathcal{C}han(n,m)$.
2. Доказано, что сюръекция многообразия Штифеля $V_n(\mathbb{C}^{nm^2})$ на пространство квантовых каналов $\mathcal{C}han(n,m)$ является открытым отображением и переводит точки локального экстремума непрерывной функции в точки локального экстремума.
3. Доказано отсутствие ловушек в кинематическом ландшафте на многообразии Штифеля для $n$-уровневой открытой квантовой системы в случае произвольного $n$ для широкого класса целевых функционалов, обладающих свойствами выпуклости на пространстве квантовых каналов.

Спасибо за внимание!