

量子・古典線形時変システムに対する 最適制御方程式の数値解法アルゴリズム

(東北大院理¹, JST-CREST², ポツダム大³, パリ大⁴, プリンストン大⁵)
大槻幸義^{1,2}, 寺西慶哲^{1,2}, Peter Saalfrank³, Gabriel Turinici⁴, Herschel Rabitz⁵

[序論]

量子系を自在に操る(制御する)ことは究極の技術であり, 21世紀の大いなるチャレンジでもある。これが実現すると例えば, 量子コンピュータ・量子通信など, 従来技術の延長上では不可能な情報処理が可能になる。量子系を制御するには, 波動関数の干渉を利用するために, レーザーパルスのような可干渉性のある外部操作が必要になる。実際, 近年の超短高強度レーザーパルス発生・整形技術の進歩に伴い, 分子ダイナミクスに着目した量子制御理論・実験が盛んに研究されている。

従来の(古典)制御の手続きをまとめると, 制御目的の決定, モデル同定, シミュレーション, 実装, となる。実装段階では大掛かりな実験装置が必要となるため, ステップ と における理論解析が非常に重要になる。量子系の制御においても, 上記手続きは系統的な取り扱いのモデルと考えられており, 理論解析・数値シミュレーションが重要な役割を果たす。本研究では, 量子・古典系に依らず, 高効率に制御シミュレーションを行うためのアルゴリズムを開発したので報告する。講演申し込み後に, 非線形系にも拡張できることが明らかになったので, 以下その結果を示す。

[理論]

以前我々は, 物理・化学的に興味ある問題は, 次の形をした目的汎関数(評価関数)により制御目的を記述できることを報告した[1,2]。即ち, 目的時刻でベクトル $|X\rangle$ または演算子 X で表される状態へ遷移させるとともに, 途中, ベクトル $|Y\rangle$ または演算子 Y で表される中間状態を経由するように問題設定する。ここでは操作量として電場 $E(t)$ を考え, パルスエネルギーを低く抑えるためのペナルティも加えておく。期待値とペナルティの評価バランスは, 時間に依存する重みパラメータ $A(t)$ により決められる。

$$J_I = 2\text{Re} \langle X | u(t_f) \rangle + 2\text{Re} \int_0^{t_f} dt \langle Y(t) | u(t) \rangle - \int_0^{t_f} \frac{dt}{A(t)} [E(t)]^2 \quad (1)$$

$$J_{II} = \langle u(t_f) | X | u(t_f) \rangle + \int_0^{t_f} dt \langle u(t) | Y(t) | u(t) \rangle - \int_0^{t_f} \frac{dt}{A(t)} [E(t)]^2 \quad (2)$$

ここではこれらの基本形をタイプ I および II とよぶことにする。制御問題は目的汎関数を最大(極大)にする電場 $E(t)$ を求める問題に帰着できる。変分法を適用することで, 最適な電場が従う方程式(パルス設計方程式)が得られる。この際, 系を表すベクトル $|u(t)\rangle$ の従う方程式により, 量子制御問題か通常の制御問題かに分かれる。ここでは, 便宜上, 操作量をパルス電場としているが, 一般には電場である必要はない。また, 標準形 I と II とが混ざった形をした目的汎関数に対しても, ここの議論はそのまま適用できる。

今回, ベクトル $|u(t)\rangle$ が次の運動方程式に従う場合,

$$\frac{\partial}{\partial t} |u(t)\rangle = |i(t)\rangle + [\alpha - \beta E(t)] |u(t)\rangle - \int_0^t d\tau \Gamma(t, \tau) |u(\tau)\rangle \quad (3)$$

パルス設計方程式を解くための単調収束アルゴリズムを提案する。ここで、 $|i(t)\rangle$ は非同次項、 $\Gamma(t, \tau)$ は記憶効果を表す積分核である[3]。今回報告する結果は、演算子(行列) α 、 β などのエルミート性に依存しないので、(3)式は量子・古典いずれの運動方程式と見なすことができる。即ち、量子・古典制御問題に対する統一的な数値解法アルゴリズムになっている。

【アルゴリズム】

例として、タイプ I の最適制御問題に対するパルス設計方程式の数値解法アルゴリズムを示す。k 回目の繰り返しステップは以下のように表される。 $E^{(k)}(t)$ が最適電場、 $\bar{E}^{(k)}(t)$ は計算の便宜上導入した補助電場を表す。

$$E^{(k)}(t) = (1 - \zeta_k) \bar{E}^{(k-1)}(t) - \zeta_k A(t) \operatorname{Re} \langle \lambda^{(k-1)}(t) | \beta | u^{(k)}(t) \rangle \quad (4)$$

$$\bar{E}^{(k)}(t) = (1 - \eta_k) E^{(k)}(t) - \eta_k A(t) \operatorname{Re} \langle \lambda^{(k)}(t) | \beta | u^{(k)}(t) \rangle \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} |u^{(k)}(t)\rangle = |i(t)\rangle + [\alpha - \beta E^{(k)}(t)] |u^{(k)}(t)\rangle - \int_0^t d\tau \Gamma(t, \tau) |u^{(k)}(\tau)\rangle \quad (6)$$

ここで、 $|\lambda(t)\rangle$ は $|u(t)\rangle$ が運動方程式(3)式に従うことを表すラグランジュ未定乗数であり、

$$\frac{\partial}{\partial t} |\lambda^{(k)}(t)\rangle = -|Y(t)\rangle - [\alpha^\dagger - \beta^\dagger \bar{E}^{(k)}(t)] |\lambda^{(k)}(t)\rangle + \int_t^{t_f} d\tau \Gamma^\dagger(t, \tau) |\lambda^{(k)}(\tau)\rangle \quad (7)$$

および終時刻条件 $|\lambda^{(k)}(t_f)\rangle = |X\rangle$ から求めることができる。(4)式および(5)式に現れるパラメータ $\{\zeta_k, \eta_k\}$ については、 $\zeta_k, \eta_k \in [0, 2]$ であるならば単調収束が保証され、本解法はアルゴリズム群を与える。

上記アルゴリズムの計算手順を以下にまとめる。

適当な初期入力電場(ゼロ次の補助電場)を使い、(7)式を使いラグランジュ未定乗数を求める

ラグランジュ未定乗数および補助電場を使い、状態方程式(6)を解き、同時に最適電場も求める。

状態および最適電場を使い、方程式(7)を解き、同時に新しい補助電場も求める。

……以下、これを繰り返す。

アルゴリズムの単調収束の証明および数値計算例については発表当日に報告する。

【参考文献】

[1] Y. Ohtsuki and H. Rabitz, *CRM Proceedings and Lecture Notes*, **33** 163 (2003).

[2] Y. Ohtsuki, G. Turinici, and H. Rabitz, *J. Chem. Phys.* **120**, 5509 (2004).

[3] Y. Ohtsuki, *J. Chem. Phys.* **119**, 661 (2003).