制御の問題から見る
動力学の普遍的構造

– Shortcuts to Adiabaticity –

高橋 和孝

東工大

2018年12月28日@京都

制御と動力学

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$$

- 動的な系で運動方程式を解きたい
- 時間1階微分の方程式
- 類似の方程式：

Hamilton-Jacobi、Langevin、…

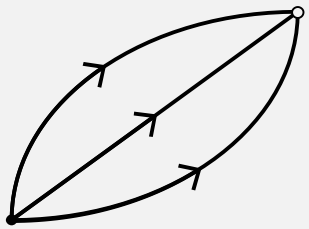
■ 制御の観点から

- 制御項を付加

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \left(\hat{H} + \hat{V}(t)\right)|\psi(t)\rangle$$

- パラメータを制御

$$\hat{H}(\boldsymbol{\lambda}(t))$$



■ 動力学の問題

- エネルギー非保存
- 固有値問題は役に立たない？
- 仕事と熱
- 速度限界

► 何か共通の原理・描像がほしい！

Assisted adiabatic passage/Transitionless driving

$$\hat{H}_0(t) = \sum_n \epsilon_n(t)|n(t)\rangle\langle n(t)|$$

Emmanouilidou Zhao Ao Niu 2000: 2-level

Demirplak Rice 2003

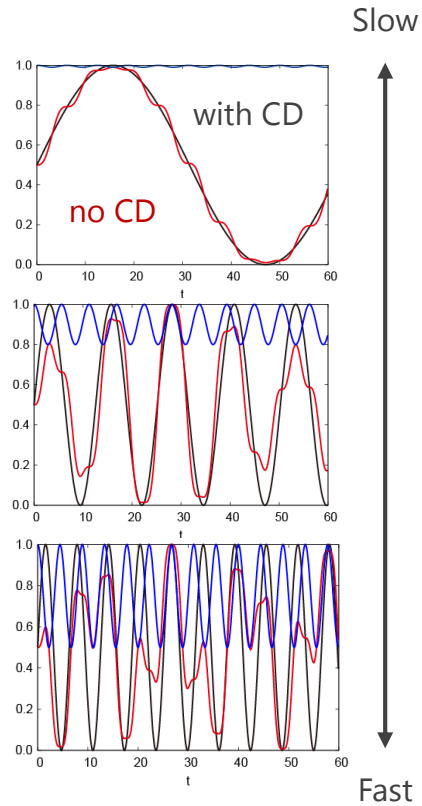
Berry 2009

- 断熱状態：瞬間固有状態による近似解

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n \mathrm{e}^{-i\int \epsilon_n(t)} \mathrm{e}^{-\int \langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle} |n(t)\rangle$$

- 制御項（Counter-Diabatic term）の付加

$$\hat{H}_{\mathrm{CD}}(t) = i\sum_n \left(1 - |n(t)\rangle\langle n(t)|\right)|\dot{n}(t)\rangle\langle n(t)|$$



- 非断熱遷移を防ぐ
- 断熱状態を厳密な解にする
- 例： $\hat{H}_0(t) = \boldsymbol{h}(t)\cdot\hat{\boldsymbol{S}} \quad \rightarrow \quad \hat{H}_{\mathrm{CD}}(t) = \dfrac{\boldsymbol{h}(t)\times\dot{\boldsymbol{h}}(t)}{\boldsymbol{h}^2(t)}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$

動的不変量とSTA

- Lewis-Riesenfeld invariant　　Lewis Riesenfeld 1969

$$i\frac{\mathrm{d}\hat{F}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{H}(t), \hat{F}(t)]$$

► 調和振動子系の解

- Shortcuts To Adiabaticity　　Bilbao group (Chen, del Campo, Muga, ...) 2010

$$\hat{F}(t) = \sum_n f_n |n(t)\rangle\langle n(t)|$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n \mathrm{e}^{-i\int \epsilon_n(t)} \mathrm{e}^{-\int \langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle} |n(t)\rangle$$

$$\hat{H}(t) = \sum_n \epsilon_n(t)|n(t)\rangle\langle n(t)| + i\sum_n (1 - |n(t)\rangle\langle n(t)|)|\dot{n}(t)\rangle\langle n(t)|$$

► Fの固有状態が断熱状態を与える

► ハミルトニアンはCD項を内包する

► 制御に使える　LR invariant-based inverse engineering

► 多数の理論・実験

ハミルトニアンの分解

$$|n(t)\rangle = \hat{U}(t)|n\rangle$$

$$\hat{H}(t) = \sum_n |n(t)\rangle\langle n(t)|\hat{H}(t)|n(t)\rangle\langle n(t)| + \sum_{m\neq n} |m(t)\rangle\langle m(t)|\hat{H}(t)|n(t)\rangle\langle n(t)|$$

$$= \sum_n \epsilon_n(t)|n(t)\rangle\langle n(t)| + i\sum_{m\neq n} |m(t)\rangle\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle\langle n(t)|$$

- 分解はいつでも可能
- 初期条件に応じて分解の仕方は変わる：状態の情報

状態変化　　状態変化

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-i\delta t\hat{H}_0(t)}\mathrm{e}^{-i\delta t\hat{H}_{\mathrm{CD}}(t)}\cdots\mathrm{e}^{-i\delta t\hat{H}_0(\delta t)}\mathrm{e}^{-i\delta t\hat{H}_{\mathrm{CD}}(\delta t)}|\psi(0)\rangle$$

位相付加　　位相付加

- エネルギーと状態変化の役割分割

動力学の構造

- パラメータ表示

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n \boxed{\mathrm{e}^{-i\int \epsilon_n(t)}} \boxed{\mathrm{e}^{-i\int \langle n(\boldsymbol{\lambda})|\boldsymbol{\nabla} n(\boldsymbol{\lambda})\rangle} |n(\boldsymbol{\lambda}(t))\rangle}$$

エネルギー固有値:
動的位相

固有状態+幾何学的位相

$$\hat{H}_0(t) = \sum_n \epsilon_n(t) |n(\boldsymbol{\lambda}(t))\rangle\langle n(\boldsymbol{\lambda}(t))|$$

$$\hat{H}_{\mathrm{CD}}(t) = \dot{\boldsymbol{\lambda}}(t)\cdot\hat{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\lambda}(t))$$

$$\hat{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\lambda}) = i\sum_n \left(1 - |n(\boldsymbol{\lambda})\rangle\langle n(\boldsymbol{\lambda})|\right) |\nabla_{\boldsymbol{\lambda}} n(\boldsymbol{\lambda})\rangle\langle n(\boldsymbol{\lambda})|$$

- 運動方程式の分解

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \to \frac{\partial}{\partial t} + \dot{\boldsymbol{\lambda}}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}}$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}_0(t)|\psi(t)\rangle$$

$$i\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}}|\psi(t)\rangle = \hat{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\lambda}(t))|\psi(t)\rangle$$

  - パラメータ $\boldsymbol{\lambda}$ の生成子 $\boldsymbol{\xi}$
  - ゼロ曲率条件

$$i\partial_{\lambda_j}\hat{\xi}_k(\boldsymbol{\lambda}) - i\partial_{\lambda_k}\hat{\xi}_j(\boldsymbol{\lambda}) = [\hat{\xi}_j(\boldsymbol{\lambda}), \hat{\xi}_k(\boldsymbol{\lambda})]$$

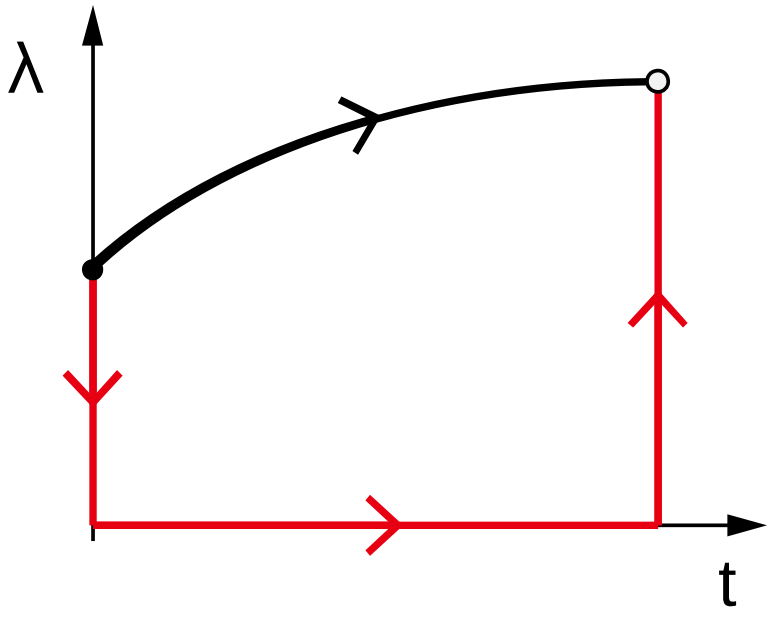
経路の変形

$$i\partial_{\lambda_j}\hat{\xi}_k(\boldsymbol{\lambda}) - i\partial_{\lambda_k}\hat{\xi}_j(\boldsymbol{\lambda}) = [\hat{\xi}_j(\boldsymbol{\lambda}), \hat{\xi}_k(\boldsymbol{\lambda})]$$

ゼロ曲率条件 = 渦なし　⇒　経路の変形ができる

Sinitsyn et al 2018

Nishimura KT 2018



► **λ** をゼロにして時間発展

古典系：Hamilton-Jacobi方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S(x(t),t) + H\left(x(t), \frac{\partial S(x(t),t)}{\partial x}, t\right) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$S(x(t),t) = \Omega(x(t), \boldsymbol{\lambda}(t)) - \int E_0(t)$$

$$\Downarrow$$

Okuyama KT 2017

$$\frac{\partial}{\partial t}S_0(x(t),t) + H_0\left(x(t), \frac{\partial \Omega(x(t),\boldsymbol{\lambda}(t))}{\partial x}, t\right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}}\Omega(x(t),\boldsymbol{\lambda}(t)) + \boldsymbol{\xi}\left(x(t), \frac{\partial \Omega(x(t),\boldsymbol{\lambda}(t))}{\partial x}, \boldsymbol{\lambda}(t)\right) = 0$$

- 量子系と同様の分割
- 作用 Ω から生成されるCD項

- 動力学の普遍的構造
- エネルギー／生成子としてのハミルトニアン
- エネルギー論と運動論の統一的記述

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \to \frac{\partial}{\partial t} + \dot{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}}$$

- CD項：移流項的な役割
- $\boldsymbol{\lambda}$ をどうやってみつけるかの問題

いろいろな理論

$$i\frac{\mathrm{d}\hat{F}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{H}(t), \hat{F}(t)]$$

- 密度演算子 — von Neumann
  - 状態の時間発展
- 動的不変量 — Lewis Riesenfeld 1969
  - STAへの応用 — Bilbao group 2010
- 最速曲線方程式 — Carlini Hosoya Koike Okudaira 2006
  - STAの最適性、安定性 — KT 2013
- Lax方程式 — Lax 1968
  - 古典非線形可積分系（KdV, 戸田,...）
  - STAへの応用 — Okuyama KT 2016
- Glazek-Wilson-Wegner flow — Glazek Wilson, Wegner 1994
  - 対角化ダイナミクス
  - Toda flow

方程式の解

$$i\frac{\mathrm{d}\hat{H}_0(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{H}_{\mathrm{cd}}(t), \hat{H}_0(t)] \qquad (\hat{F}(t) = \hat{H}_0(t))$$

$$\hat{H}_0(t) = \hat{p}^2 + u(\hat{x}, t)$$

Okuyama KT 2016

- CD項がpの1次の場合

$$\hat{H}_{\mathrm{cd}}(t) = v(t)\hat{p} + \epsilon(\hat{x}, t) \quad \Longrightarrow \quad u(x,t) = u_0\left(x - \int v(t)\right)$$

► 並進運動系

► pの2次でも同様

- pの3次

$$\hat{H}_{\mathrm{cd}}(t) = \frac{a(t)}{4}\left(4\hat{p}^3 + 3\left(\hat{p}u(\hat{x},t) + u(\hat{x},t)\hat{p}\right)\right)$$

$$\Longrightarrow \quad \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{a(t)}{4}\left(6u(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial^3 u(x,t)}{\partial x^3}\right) = 0$$

► KdV方程式！

- pの高次 $\Longrightarrow$ 高次KdV方程式！

Lax形式

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - 6u(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} + \frac{\partial^3 u(x,t)}{\partial x^3} = 0$$

Laxペア　　Lax (1968)

$$L = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + u(x,t)$$

$$M = -4\frac{\partial^3}{\partial x^3} + 6u(x,t)\frac{\partial}{\partial x} + 3\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} = [M, L]$$

$$L\psi = \lambda\psi$$

$$\dot{\lambda} = 0$$

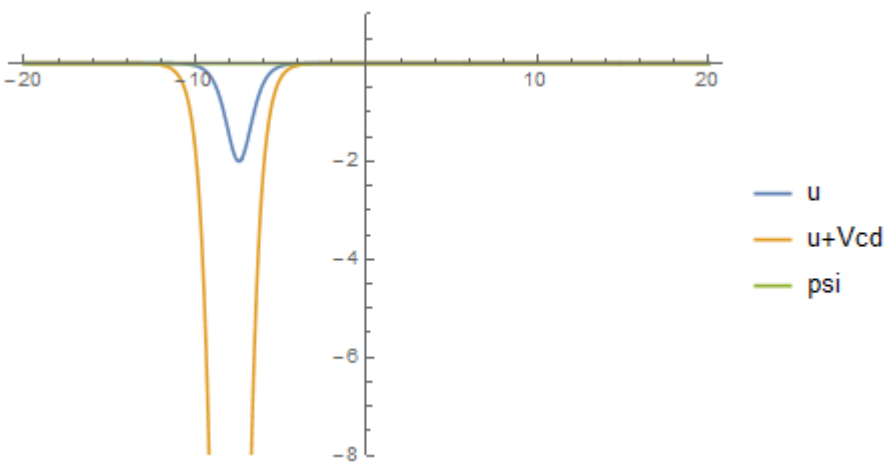
$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = M\psi$$

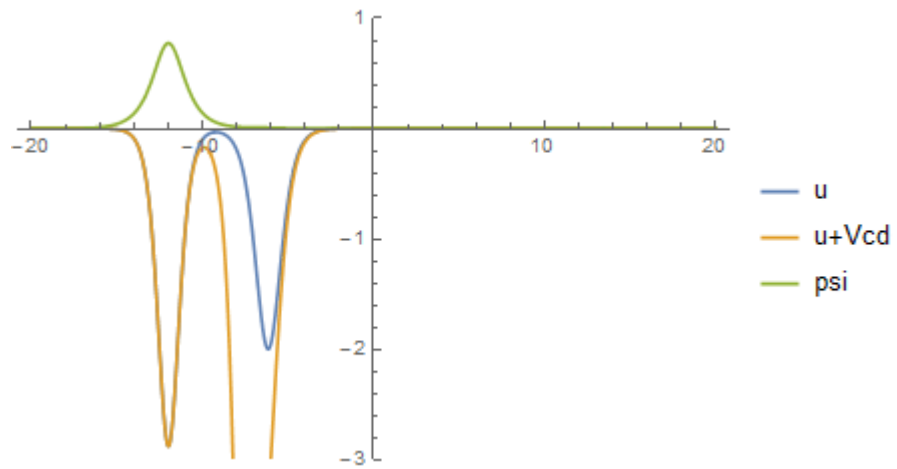
- 可積分性の表現
- 階層KdV等網羅的な解
- 他の系統　　戸田：1次元XY模型

  Sine-Gordon

  無分散KdV：古典

ソリトンポテンシャルの制御





Okuyama KT 2016

http://www.stat.phys.titech.ac.jp/~ktaka/files/kdv.gif

http://www.stat.phys.titech.ac.jp/~ktaka/files/kdv-fast.gif

Glazek-Wilson-Wegner flow

$$\frac{\mathrm{d}\hat{H}(\ell)}{\mathrm{d}\ell} = [\hat{\eta}(\ell), \hat{H}(\ell)]$$

Glazek Wilson 1994

Wegner 1994

$$\hat{\eta}(\ell) = [\hat{H}_{\mathrm{diag}}(\ell), \hat{H}(\ell)]$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\ell} \sum_{i,j(i\neq j)} H_{ij}H_{ji} = -2\sum_{i,j}(H_{ii} - H_{jj})^2 H_{ij}H_{ji} \leq 0$$

- ハミルトニアンを対角化
- H（H_0）からCD項がわかる
- 三重対角行列への適用： Toda flow

1次元XY 模型と等価

非平衡ダイナミクスへ

- 非平衡過程に適用したら？
- 非平衡関係式を規定？
- 熱と仕事の分離？

■ 孤立系

- ユニタリーダイナミクス
- 仕事の分離？

■ 外界と結合した系

- Langevin・Master・FP
- 熱の分離？

孤立系の仕事とSTA

$$\mathrm{P}(W,t) = \sum_n p_n(0)\langle n|\hat{U}^\dagger(t)\delta\left(W - (\hat{H}(t) - \epsilon_n(0))\right)\hat{U}(t)|n\rangle$$

$$[W]_t = \sum_n p_n(0)\left(\epsilon_n(t) - \epsilon_n(0)\right)$$

$$[W^2]_t = \sum_n p_n(0)\left(\epsilon_n(t) - \epsilon_n(0)\right)^2 + \sum_n p_n(0)\langle\dot{n}(t)|\left(1 - |n(t)\rangle\langle n(t)|\right)|\dot{n}(t)\rangle$$

Funo Zhang Chatou Kim Ueda del Campo 2017

初期分布の時間発展　H(t)の分布

$$\Sigma(t) = \beta[W]_t - \beta(F_t - F_0) = D_{\mathrm{KL}}(\hat{\rho}(0 \to t)||\hat{\rho}(t))$$

$$D_{\mathrm{KL}}(\hat{\rho}(0 \to t)||\hat{\rho}(t)) = D_{\mathrm{KL}}(\hat{\rho}(0 \to t)||\hat{\rho}_0(t)) + D_{\mathrm{KL}}(\hat{\rho}_0(t)||\hat{\rho}(t))$$

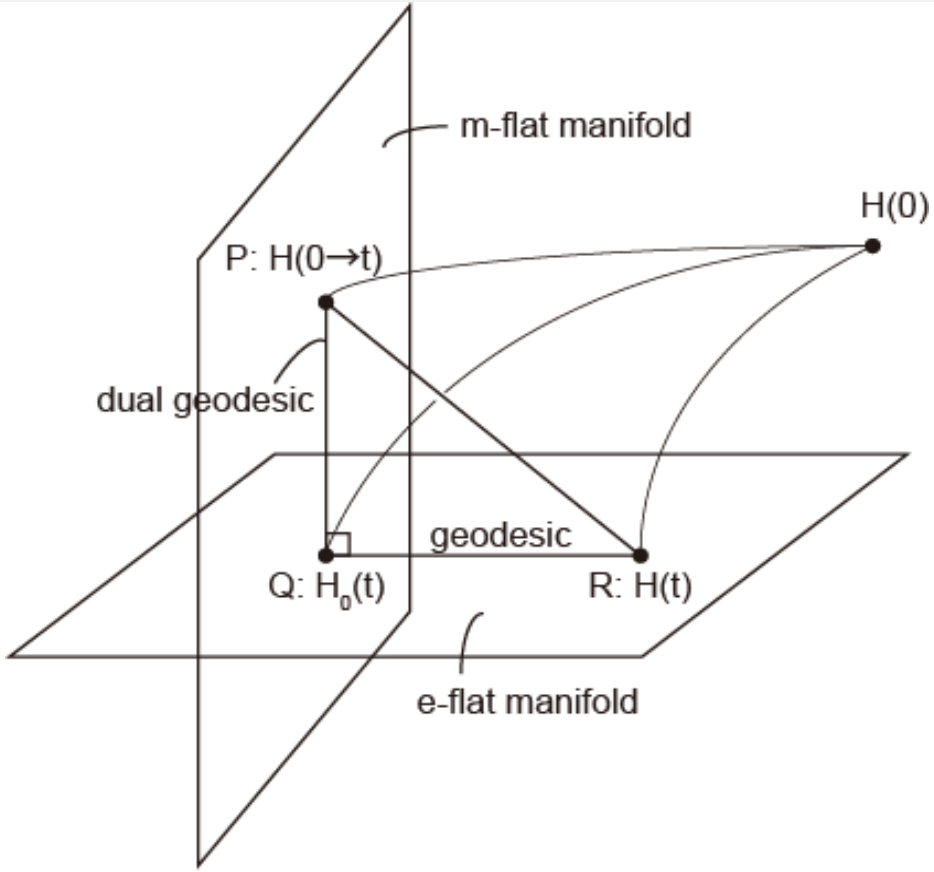
H_0(t)の分布

KT 2017

Pythagorasの定理：情報幾何学的解釈

$$D_{\mathrm{KL}}(\hat{\rho}(0 \to t)||\hat{\rho}(t)) = D_{\mathrm{KL}}(\hat{\rho}(0 \to t)||\hat{\rho}_0(t)) + D_{\mathrm{KL}}(\hat{\rho}_0(t)||\hat{\rho}(t))$$

KT 2017



- 3つの分布は直角三角形を形成
- PQの双対測地線とQRの測地線が直交

熱の分割

Fujii KT in progress...

$$\frac{\mathrm{d}p_i(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_j W_{ij}(t)p_j(t) \qquad W(t) = W^{(0)}(t) + W^{(\mathrm{CD})}(t)$$

- ハミルトニアンと同様の分割
- $W^{(0)}$は定常状態条件を満たす

Preliminary Results
(removed)

まとめ

- 動力学の普遍的構造
- エネルギー／生成子としてのハミルトニアン
- エネルギー論と運動論の統一的記述
- さまざまな応用