

## 基于抽样学习的开放量子系综时间最优控制

祁鹏, 匡森

(中国科学技术大学自动化系, 安徽合肥 230027)

**摘要:** 针对哈密顿量具有波动的、大量成员系统构成的开放量子系综, 在密度矩阵的相干矢量体系下提出了一个双阶段近似时间最优控制算法, 实现了系综中所有成员系统对于一个共同目标态的高保真度状态转移, 同时确保了控制时间的近似最小. 该算法首先根据表征系综哈密顿量波动情况的参数分布律对系综进行采样以便得到代表系综特性的一个样本系统集; 然后基于该样本系统集、并借助基本的梯度法在两个阶段中分别对保真度和控制时间进行优化, 得到了最终的最优控制律; 最后在两能级开放量子系综上进行了数值仿真实验, 验证了所提出算法的有效性.

**关键词:** 开放量子系综; 时间最优控制; 相干矢量

**中图分类号:** TP391      **文献标识码:** A      doi: 10.3969/j.issn.0253-2778.2019.10.001

**引用格式:** 祁鹏, 匡森. 基于抽样学习的开放量子系综时间最优控制[J]. 中国科学技术大学学报, 2019, 49(10): 775-780, 790.

QI Peng, KUANG Sen. Time-optimal control of open quantum ensembles based on sampling and learning[J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2019, 49(10): 775-780, 790.

## Time-optimal control of open quantum ensembles based on sampling and learning

QI Peng, KUANG Sen

(Department of Automation, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

**Abstract:** For open quantum ensembles with Hamiltonian fluctuations composed of a large number of single quantum systems, a two-stage approximate time-optimal control algorithm is proposed in the framework of coherence vectors of density matrices and achieves a high-fidelity state transition of all member systems to a common target state within an approximate minimum control time. According to the parameter distribution rule that characterizes Hamiltonian fluctuations, this algorithm first samples the whole ensemble to obtain a sample system set. Then, based on the obtained sample system set and via the basic gradient method, the fidelity and the control time are optimized in the two stages respectively, and the resulting optimal control law is obtained. Numerical simulation experiments on a two-level open quantum ensemble verify the effectiveness of the proposed algorithm.

**Key words:** open quantum ensemble; time-optimal control; coherence vector

收稿日期: 2018-04-19; 修回日期: 2018-10-13

基金项目: 安徽省自然科学基金(1708085MF144), 国家自然科学基金(61873251) 资助.

作者简介: 祁鹏, 男, 1992年生, 硕士生. 研究方向: 量子优化控制. Email: qpeng@mail.ustc.edu.cn

通讯作者: 匡森, 博士/副教授. Email: skuang@ustc.edu.cn

## 0 引言

量子系综是处于相同宏观条件下大量相互独立的微观粒子的集合<sup>[1]</sup>,在量子信息技术中具有重要作用.例如,不同自旋系综间存在的强耦合性使其能够在量子通信<sup>[2]</sup>、量子存储<sup>[3]</sup>等领域承担信息的载体.量子系统控制的一个重要任务是设计合适的控制律操纵量子态使其达到并稳定在期望目标态.实现量子信息的传递或处理本质上也是对量子态的操控.随着量子控制理论与技术的发展<sup>[4-6]</sup>,量子系综的调控问题也引起了人们的广泛关注<sup>[7-9]</sup>.对量子系综而言,一些特定的分析和控制方法通常是必要的.

封闭量子系综与外界环境的相互作用可以忽略,因此其状态演化的规律相对简单.目前封闭量子系综控制的研究已经取得了一系列研究成果. Ruths 等<sup>[10]</sup>针对非均匀封闭量子系综,利用多维伪光谱法将含时系统哈密顿量的最优控制问题转化为代数非线性规划问题,从而简化了补偿脉冲序列的求解过程.文献<sup>[11]</sup>借助 Lyapunov 方法研究了无相互作用的自旋 1/2 量子系综的镇定问题.此外,文献<sup>[12-13]</sup>针对封闭量子系综成员的状态转移控制问题提出了基于采样学习的控制方法,该方案通过对量子系综进行参数取样得到一个代表系综特性的样本集,并针对该样本集设计统一形式的最优控制律.需要指出的是,在实际应用中,量子系综与外部环境的耦合会产生耗散或消相干效应,这将使系统变为开放系综,其动力学将更杂.此时,对其进行控制要比封闭量子系综困难得多,例如,在核磁共振实验中,自旋量子系综会因射频场不均匀(RF inhomogeneity)和拉莫尔色散现象(Larmor dispersion)而产生大量的分散体,文献<sup>[14-15]</sup>通过设计更复杂的反向激发脉冲来抑制这种分散体的产生,包括磁共振成像中的选择激发块和反向脉冲的设计<sup>[16-17]</sup>等.

任一量子系统或量子系综与环境的耦合都会产生消相干效应,它将严重破坏量子系统所携带的有效信息.为减小消相干效应,有必要在最短的时间内完成量子系统或系综的控制<sup>[18-20]</sup>.针对单量子自旋 1/2 系统,文献<sup>[21-23]</sup>利用基于庞特里亚金最大值原理的几何方法实现了系统的时间最优轨迹控制. Carlini 等<sup>[24]</sup>利用变分原理解决了时间最优演化门操作问题.应该指出,上述研究仅考虑了低维系统的

控制.为了实现高维自旋耦合量子系统的相干态转移控制,文献<sup>[25]</sup>通过设计么正演化算子所需的最小时间脉冲序列提出了一种基于梯度搜索的时间最优控制算法. Chen 等<sup>[26]</sup>则针对单量子系统提出了一个双阶段近似时间最优控制算法,该算法首先利用梯度优化算法寻找使得系统状态以期望的保真度达到目标态的控制律;然后在保证目标态的保真度基本不变的前提下;进一步优化控制时间直到控制时间不再减小,从而获得近似最小控制时间.

本文研究 Lindblad 主方程描述的开放量子系综的时间最优控制问题,提出基于采样学习的开放量子系综近似时间最优控制算法.特别地,我们将借助密度矩阵的相干矢量表示将 Lindblad 主方程下的最优控制问题转化为实欧几里得空间中矢量形式的最优控制问题,以便直接利用传统的梯度优化算法.通过使用双阶段多目标优化算法求解目标函数的极值,得到相应的时间最优控制律,实现所有系综成员对于公共目标态的高保真度状态转移.

## 1 模型和问题描述

### 1.1 开放量子系统

对于一个  $n$  能级开放量子系统,其密度算子的状态演化由下面的 Lindblad 主方程描述:

$$i\hbar \frac{d}{dt}\rho(t) = [H_0 + \sum_{m=1}^M u_m(t)H_m, \rho(t)] + \mathcal{D}(\rho(t)) \quad (1)$$

式中,  $i = \sqrt{-1}$  为虚数单位,  $H_0$  是系统的自由哈密顿量,  $u_m(t)H_m$  是控制哈密顿量,  $u_m(t)$  为控制场,  $\hbar$  为约化普朗克常数(为方便计算,本文取  $\hbar = 1$ ).  $M$  表示对量子系统所施加的控制场个数,  $[A, B] = AB - BA$  表示对易运算,  $\mathcal{D}(\rho(t))$  是系统演化的非么正部分,用来表示系统与外部环境耦合所引起的耗散,具体形式为

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\rho(t)) = & i \sum_{j=1}^{n^2-1} \frac{1}{2} ([L_j, \rho(t)L_j^\dagger], [L_j\rho(t), L_j^\dagger]) = \\ & i \sum_{j=1}^{n^2-1} (L_j\rho(t)L_j^\dagger - \frac{1}{2}L_j^\dagger L_j\rho(t) - \frac{1}{2}\rho(t)L_j^\dagger L_j) \end{aligned} \quad (2)$$

式中,  $L_j$  是 Lindblad 算子,表征系统与外部环境之间的耗散通道.

为了便于分析,对于上述  $n$  能级开放量子系统模型,我们采用相干矢量体系进行矢量化表示<sup>[27]</sup>.

首先选取一组正交基  $\{\hat{\lambda}_i\}_{i=1}^{n^2-1}$ , 且满足

$$\hat{\lambda}_i^\dagger = \hat{\lambda}_i, \text{Tr}(\hat{\lambda}_i) = 0, \text{Tr}(\hat{\lambda}_i \hat{\lambda}_j) = 2\delta_{ij} \quad (3)$$

以  $\{\hat{\lambda}_i\}_{i=1}^{n^2-1}$  为基底, 任一密度矩阵可以写作

$$\rho = \frac{1}{n}I + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n^2-1} x_i \hat{\lambda}_i \quad (4)$$

式中,  $x_i = \text{Tr}(\hat{\lambda}_i \rho)$ . 列向量  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{n^2-1})^\top$  称为密度矩阵  $\rho$  的相干矢量. 将式(4)代入式(1)可以得到如下相干矢量的演化方程:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M u_m(t) g_m(\mathbf{x}) \quad (5)$$

式中,  $f(\mathbf{x}) = (\mathcal{L}_{H_0} + \mathcal{L}_D)\mathbf{x} + \mathbf{c}$ ,  $g_m(\mathbf{x}) = \mathcal{L}_{H_m}\mathbf{x}$ ,  $\mathcal{L}_{H_0}$ ,  $\mathcal{L}_{H_m}$  和  $\mathcal{L}_D$  均为  $(n^2-1) \times (n^2-1)$  的方阵, 其第  $h$  行、第  $k$  列元素分别为

$$(\mathcal{L}_{H_0})_{hk} = \text{Tr}(iH_0[\hat{\lambda}_h \hat{\lambda}_k]) \quad (6)$$

$$(\mathcal{L}_{H_m})_{hk} = \text{Tr}(iH_m[\hat{\lambda}_h \hat{\lambda}_k]) \quad (7)$$

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}_D)_{hk} &= \sum_{j=1}^{n^2-1} \{ \text{Tr}(L_j^\dagger \hat{\lambda}_h L_j \hat{\lambda}_k) - \\ &\frac{1}{2} \text{Tr}(L_j^\dagger L_j \hat{\lambda}_h \hat{\lambda}_k + L_j^\dagger L_j \hat{\lambda}_k \hat{\lambda}_h) \} \end{aligned} \quad (8)$$

$\mathbf{c}$  是一个  $n^2-1$  维列矢量, 其第  $h$  个元素为:

$$c_h = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n^2-1} \text{Tr}([L_j, L_j^\dagger] \hat{\lambda}_h) \quad (9)$$

## 1.2 非均匀开放量子系综

本文考虑非均匀开放量子系综的时间最优控制问题, 每个成员系统的状态演化满足如下 Lindblad 主方程:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{\omega, \theta}(t) = [H_{\omega, \theta}(t), \rho_{\omega, \theta}(t)] + \mathcal{D}(\rho_{\omega, \theta}(t)) \quad (10)$$

其哈密顿量  $H_{\omega, \theta}(t)$  形式为

$$H_{\omega, \theta}(t) = \mathcal{B}(\omega)H_0 + \mathcal{G}(\theta) \sum_{m=1}^M u_m(t) H_m \quad (11)$$

式中,  $\mathcal{B}(\omega)H_0$  和  $\mathcal{G}(\theta)H_m$  分别表征成员系统的自由哈密顿量和控制哈密顿量,  $\mathcal{B}(\omega)$  和  $\mathcal{G}(\theta)$  分别表示自由哈密顿量和控制哈密顿量的波动情况. 本文假定  $\mathcal{B}(\omega) = \omega$ ,  $\mathcal{G}(\theta) = \theta$ , 且  $\omega$  和  $\theta$  分别在  $[1-\omega, 1+\omega]$  和  $[1-\theta, 1+\theta]$  范围内服从均匀分布. 我们希望通过公共控制律  $u_m(t)$  的设计, 使得量子系综中的每个成员系统在最短时间内从初始态  $\rho_0$  转移到目标态  $\rho_f$ . 在正交基底展开为相干矢量表示的情况下(请见式(5)), 本文的控制问题被重写为: 设计公共控制律  $u_m(t)$ , 使每个系综成员对应的相干矢量在尽可能短时间内从初始值  $\mathbf{x}_0$  控制到期望值

$\mathbf{x}_f$ . 为此, 对于系综中每个单量子系统, 我们定义性能指标函数如下:

$$J_{\omega, \theta}(u) = 1 - \frac{n}{8(n-1)} \|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_{\omega, \theta}(T)\|^2 \quad (12)$$

考虑到人们难以对系综中的每个成员系统分别设计一个控制律, 我们采用基于抽样学习的方法来解决此问题<sup>[12]</sup>. 该方法首先通过取样得到代表整个系综信息的样本系统集, 然后对该样本系统集进行优化设计. 通过将区间  $[1-\omega, 1+\omega]$  和  $[1-\theta, 1+\theta]$  分别划分为  $N_\omega - 1$  和  $N_\theta - 1$  个相等的子区间, 其中,  $N_\omega - 1$  和  $N_\theta - 1$  分别表示量子系综中的参数变量  $\omega$  和  $\theta$  在各自取值空间内的采样个数, 并取

$$\left. \begin{aligned} \omega_{n_\omega} &= 1 - \omega + n_\omega \frac{2\omega}{N_\omega - 1}, n_\omega = 0, 1, \dots, N_\omega - 1 \\ \theta_{n_\theta} &= 1 - \theta + n_\theta \frac{2\theta}{N_\theta - 1}, n_\theta = 0, 1, \dots, N_\theta - 1 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

我们就得到了含有  $N = N_\omega N_\theta$  个系综成员的样本系统, 以便设计最短时间  $T$  和最优控制律  $u_m(t)$ . 基于所得到的样本系统集, 我们定义如下性能指标函数

$$\begin{aligned} J &\equiv J_N(T, u) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N J_n(T, u) = \\ &\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left( 1 - \frac{n}{8(n-1)} \|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_n(T)\|^2 \right) \end{aligned} \quad (14)$$

这样, 本文的控制问题可转化为如下双目标优化问题

$$\left. \begin{aligned} \max J \\ \min T \end{aligned} \right\}$$

约束条件为

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}_n(t)}{dt} &= (\omega_n \mathcal{L}_{H_0} + \mathcal{L}_D)\mathbf{x}_n(t) + \theta_n \sum_{m=1}^M u_m(t) g_m(\mathbf{x}_n(t)) \\ \mathbf{x}_n(0) &= \mathbf{x}_0 \\ \omega_n &\in [1-\omega, 1+\omega], \theta_n \in [1-\theta, 1+\theta] \end{aligned} \right\}$$

注意,  $N_\omega$  和  $N_\theta$  的具体取值通常根据经验来选择. 一般而言, 它们的取值越大, 则最终的抽样近似效果越好. 为了简化计算并加速优化过程, 通常选取较小的  $N_\omega$  和  $N_\theta$  值. 实际中, 需要借助试探的方法来获得它们的大概取值.

## 2 近似时间最优控制方案

本节首先给出本文近似时间最优控制算法的框

架思路;然后分别推导两个阶段中优化算法的迭代方向表达式;最后给出算法的具体步骤.

### 2.1 近似时间最优控制算法

通过对控制律离散化为  $M$  个点,可以将控制律近似写成如下列矢量的形式:

$$\mathbf{u} = [u_1(t), u_2(t), \dots, u_M(t)]^T \quad (15)$$

由于时间  $T$  也是性能指标函数  $J$  的自变量,因此  $J$  是关于列矢量  $\mathbf{s} = [T, \mathbf{u}^T]^T$  的函数. 我们将满足  $J(\mathbf{s}) = J_0$  的  $\mathbf{s}$  的集合称为  $J(\mathbf{s})$  在  $J_0$  处的水平集,即

$$\mathcal{L}(J_0) = \{x; J(x) = J_0, T > 0\} \quad (16)$$

为了寻找使得性能指标  $J$  最大化和  $T$  最小化的近似最优解  $\mathbf{s}^*$ , 我们采用如下分层处理方法:首先在给定足够大的初始值  $T = T_0$ . 下单独对性能指标函数  $J$  进行极大化,然后在保持性能指标函数值基本不变的情况下对时间  $T$  进行极小化. 该方法对应如下两个迭代过程:

**过程 1** 给定一个足够大的初始时间  $T = T_0$ , 并保持其不变. 使控制律  $u(t)$  沿着梯度方向  $\nabla_u J = \frac{\partial J}{\partial u}$  进行迭代. 当性能指标  $J$  达到设定的极大值  $J_H$  时,迭代终止.

**过程 2** 在性能指标函数的水平集  $\mathcal{L}(J = J_H)$  中,寻求矢量  $\mathbf{s}$  的迭代方向  $\Delta \mathbf{s}$ , 以便  $\mathbf{s}$  沿此方向迭代时,时间  $T$  不断减小且目标函数  $J$  在  $J_H$  值附近变化最慢. 当  $J$  低于某一预定值  $J_L (J_L < J_H)$  时,迭代终止.

应该注意,当过程 2 的迭代结束时,人们可以将算法返回过程 1 继续执行下一轮迭代以便进一步减小控制时间. 若性能指标  $J$  在下一轮过程 1 的迭代中不能达到极大值  $J_H$ , 则整个算法终止. 当过程 1 结束时,  $J = J_H$ . 此时,过程 2 中的更新方向  $\Delta \mathbf{s}$  应满足两个条件:①  $\Delta \mathbf{s}$  与梯度  $\nabla_s J$  垂直;②  $\Delta \mathbf{s}$  的第一个元素小于 0. 条件 1) 确保了  $\mathbf{s}$  在迭代更新时,性能指标函数  $J$  在  $J_H$  附近变化最慢. 条件 2) 确保了  $\mathbf{s}$  的首个元素(即时间  $T$ ) 在迭代中是不断减小的. 基于此,我们给出更新方向  $\Delta \mathbf{s}$  的具体公式为

$$\Delta \mathbf{s} = - \left( I - \frac{\nabla_s J(T, \mathbf{u}) \nabla_s^T J(T, \mathbf{u})}{\|\nabla_s J(T, \mathbf{u})\|^2} \right) = \frac{e^T \nabla_s J(T, \mathbf{u})}{\|\nabla_s J(T, \mathbf{u})\|^2} \nabla_s J(T, \mathbf{u}) - e \quad (17)$$

式中,  $e = [1, 0, \dots, 0]^T$ ,  $\nabla_s^T J(T, \mathbf{u})$  是性能指标函数关于变量  $\mathbf{s}$  的梯度.

### 2.2 性能指标的梯度

上述双阶段优化方案的两个过程中分别包含梯度  $\nabla_u J$  和  $\nabla_s J(T, \mathbf{u})$ . 为了确定这两个梯度,我们需要推导性能指标函数  $J$  关于控制律  $u_m(t)$  以及时间  $T$  的偏导数. 利用变分法,由式(4)可以得到  $\Delta \mathbf{x}(t)$  和  $\Delta u_m(t)$  之间的泛函关系式为

$$\frac{d}{dt} \Delta \mathbf{x}(t) = \left( \nabla_x f(\mathbf{x}(t)) + \sum_{m=1}^M u_m(t) \nabla_x g_m(\mathbf{x}(t)) \right) \Delta \mathbf{x}(t) + g_m(\mathbf{x}) \Delta u_m(t) \quad (18)$$

令  $A(t) = e^{\int \nabla_x f(\mathbf{x}(t)) + \sum_{m=1}^M u_m(t) \nabla_x g_m(\mathbf{x}(t)) dt}$ , 解上式微分方程可得到

$$\Delta \mathbf{x}(t) = A(t) \int A(-t) g_m(\mathbf{x}) \Delta u_m(t) dt \quad (19)$$

当  $t = T$  时,我们可以得到

$$\Delta \mathbf{x}(T) = A(T) \int A(-t) g_m(\mathbf{x}(t)) \Delta u_m(t) dt \quad (20)$$

基于式(20),可以推出  $\mathbf{x}(T)$  关于  $u_m(t)$  的变分为

$$\frac{\Delta \mathbf{x}(T)}{\Delta u_m(t)} = A(T) A(-t) g_m(\mathbf{x}(t)) \quad (21)$$

根据求导的链式法则,单个样本性能指标  $J_n$  关于控制律的偏导数为

$$\frac{\partial J_n}{\partial u_m(t)} = \left( \frac{\partial J_n}{\partial \mathbf{x}(T)} \right)^T \frac{\partial \mathbf{x}(T)}{\partial u_m(t)} = \frac{n}{8(n-1)} (2\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_n(T))^T A_n(T) A_n(-t) g_m(\mathbf{x}_n(t)) \quad (22)$$

因此,样本系统的性能指标函数  $J$  对于控制律  $u_m(t)$  的偏导数为

$$\frac{\partial J}{\partial u_m(t)} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \nabla_{\mathbf{x}(T)}^T J_n A_n(T) A_n(-t) g_m(\mathbf{x}_n(t)) \quad (23)$$

式中,  $\nabla_{\mathbf{x}(T)}^T J_n = \left( \frac{\partial J_n}{\partial \mathbf{x}(T)} \right)^T = \frac{n}{8(n-1)} (2\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_n(T))^T$ .

而性能指标函数  $J$  对于时间  $T$  的偏导数计算为

$$\frac{\partial J}{\partial T} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left( \nabla_{\mathbf{x}(T)}^T J_n (f(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M u_m(t) g_m(\mathbf{x})) \right) \quad (24)$$

综合式(23)和式(24),可以得到性能指标函数  $J$  对于  $\mathbf{s}$  的梯度为

$$\nabla_s J = \frac{dJ}{ds} = \left[ \frac{\partial J}{\partial T}, \frac{\partial J}{\partial u_1(t)}, \dots, \frac{\partial J}{\partial u_M(t)} \right]^T \quad (25)$$

基于算法的两个迭代过程和梯度方向,我们给出本文近似时间最优控制算法的具体步骤:

步骤 1 给定足够大的初始时间  $T = T_0$ , 并随机选取一组初始控制律  $\{u_m^{(0)}(t), m = 1, \dots, M\}$ ,  $t \in [0, T]$ ;

步骤 2 设置初始迭代步数  $d = 0$ ;

步骤 3 根据式(23)计算性能指标函数  $J$  关于控制律  $u_m(t)$  的梯度;

步骤 4 更新控制律:  $u_m^{(d+1)} = u_m^{(d)} + \eta_1 \nabla_{u_m} J$ , 其中  $\eta_1$  表示迭代步长;

步骤 5  $d = d + 1$ ;

步骤 6 重复执行步骤 3 ~ 5, 直到  $J \geq J_H$  或循环达到预设步数, 迭代中止, 转下一步;

步骤 7 设置  $s$  的初始迭代步数  $l = 0$ ;

步骤 8 由式(25)计算性能指标函数  $J$  关于矢量  $s$  的梯度  $\nabla_s J$ ;

步骤 9 由式(17), 更新控制矢量:  $s^{(l+1)} = s^{(l)} + \eta_2 \Delta s$ ;

步骤 10  $l = l + 1$ ;

步骤 11 重复执行 8 ~ 10 步, 直到  $J \leq J_L$  或循环次数  $l$  达到预设的上限;

步骤 12 从所得到的矢量  $s^*$  中提取出近似的最优控制律  $u_m^*(t)$  和近似最小时间  $T^*$ .

### 3 数值仿真实验

考虑一个两能级开放量子系综, 正交基底选为泡利算子, 即  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ . 量子系综的初始态给定为  $\rho_0 = |0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ , 期望的目标态为  $\rho_f = |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ . 假定在正交基变换下密度算子对应的相干矢量的初始值是  $\mathbf{x}_0 = (0, 0, 1)^T$ , 期望的目标态是  $\mathbf{x}_f = (0, 0, -1)^T$ , 系统的自由哈密顿量为  $H_0 = \frac{1}{2}\sigma_z$ , 控制哈密顿量为  $H_1 = \frac{1}{2}\sigma_x + \frac{1}{2}\sigma_y$ , Lindblad 算子具有如下形式:  $L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0.1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0.2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $L_3 = \begin{pmatrix} 0.2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ .

由式(4)可以得到样本系统的相干矢量  $\mathbf{x}_n(t)$  满足如下动力学方程:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}_n(t) = \begin{pmatrix} -0.09 & -2\omega_n & 0 \\ 2\omega_n & 2\omega_n & 0 \\ 0 & 0 & -0.1 \end{pmatrix} \mathbf{x}_n(t) + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.03 \end{pmatrix} + u(t)\theta_n \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & -2 \\ -2 & 2 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{x}_n(t) \quad (26)$$

进一步, 我们假定反映系统自由哈密顿量和控制哈密顿量波动的参数  $\omega$  和  $\theta$  均在  $[0.8, 1.2]$  范围内服从均匀分布, 即  $\omega = \theta = 0.2$ . 选择样本参数为  $N_\omega = N_\theta = 5$ , 则样本总数为  $N = N_\omega N_\theta = 25$ . 仿真中, 我们取初始演化时间为  $T_0 = 2$ , 迭代步长  $\eta_1 = 0.1$ ,  $\eta_2 = 0.04$ , 取初始控制律  $u_1(t) = \sin t$ ,  $J_H = 0.985$ ,  $J_L = 0.950$ .

仿真结果如图 1 和 2 所示, 其中图 1 表示初始控制律和最终的最优控制律的变化情况, 虚线代表初始控制律, 实线代表在近似最优时间  $T = 1.6349$  的最终控制律. 图 2 表示性能指标函数的变化, 蓝色短曲线对应过程 1, 红色长实线对应过程 2. 在该双阶段优化中, 过程 1 迭代了 800 步, 过程 2 迭代了 37 步, 最终性能指标的值为 0.949 3, 近似最优时间是  $T^* = 1.634 9$ . 相比初始时间  $T_0 = 2$ , 最终的最优控制时间下降了 18%.

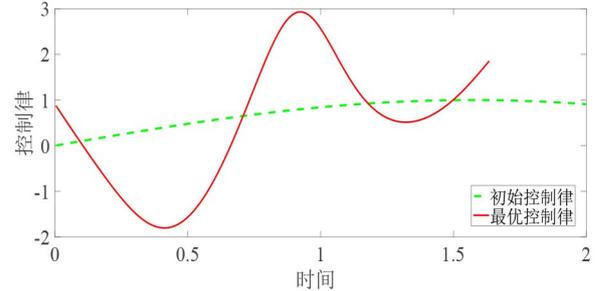


图 1 近似时间最优控制律的变化曲线

Fig. 1 Curve of approximate time-optimal control law

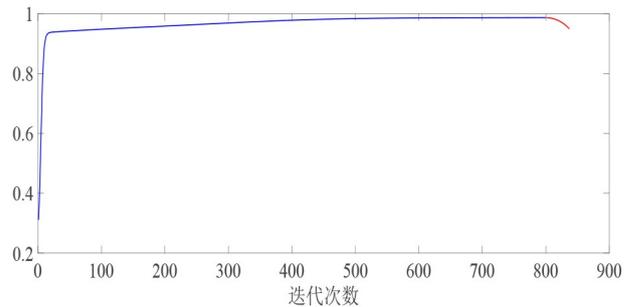


图 2 性能指标函数随迭代次数的变化曲线

Fig. 2 Curve of performance index function with iteration times variation

为了检验近时间最优控制算法对于整个系综的控制效果,我们在参数  $\omega$  和  $\theta$  的取值范围内随机选取 200 个成员系统,并利用图 1 中近似最优时间  $T^* = 1.6349$  上的最优控制律驱动每个成员系统. 成员系统的性能指标函数值的分布情况如图 3 所示,其中保真度的平均值为 0.9493. 这说明,基于样本集得到的最优控制律对整个系综具有满意的控制效果.

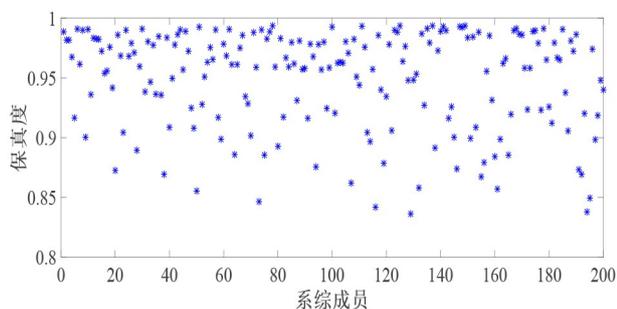


图 3 算法得到的近似时间最优控制律对整个系综中随机抽取的 200 个成员系统的控制效果

Fig. 3 Control effect of the 200 member system randomly selected from the whole ensembles on approximate time optimal control law obtained by the algorithm

## 4 结论

本文研究了  $n$  能级开放量子系综的时间最优控制问题,在密度矩阵的相干矢量体系下给出了一个基于采样学习的双阶段近似时间最优控制算法,该算法通过梯度法搜索出公共控制律,能够实现系综中所有成员系统对同一目标态的高保真度状态转移,且控制时间能够达到近似最小. 应该指出,本文算法的计算量随着量子系综维数的增加将呈指数增长. 如何优化算法以减小高维系统的计算量需要专门的研究. 此外,本文的算法建立在基本的梯度优化算法基础之上,这不可避免地会出现局部最优现象,因此如何更好地避开局部最优从而实现对开放量子系综的全局时间最优控制也值得进一步的研究.

### 参考文献 (References)

[1] BLOKHINTSEV D I. Foundations of quantum mechanics [A]// Quantum Mechanics, Springer, 1964: 31-59.  
 [2] DUAN L M, LUKIN M D, CIRAC J I, et al. Long-distance quantum communication with atomic ensembles and linear optics[J]. Nature, 2001, 414: 413-418.

[3] BENSKY G, PETROSYAN D, MAJER J, et al. Optimizing inhomogeneous spin ensembles for quantum memory [J]. Physical Review A, 2012; 86 (1): 012310.  
 [4] DONG D Y, PETERSEN I R. Quantum control theory and applications: A survey[J]. IET Control Theory & Applications, 2010; 4(12): 2651-2671.  
 [5] KUANG S, CONG S. Lyapunov control methods of closed quantum systems[J]. Automatica, 2008; 44 (1): 98-108.  
 [6] KUANG S, DONG D Y, PETERSEN I R. Rapid Lyapunov control of finite-dimensional quantum systems[J]. Automatica, 2017, 81: 164-175.  
 [7] KALACHEV A, KRÖLL S. Coherent control of collective spontaneous emission in an extended atomic ensemble and quantum storage[J]. Physical Review A, 2006, 74(2): 023814.  
 [8] MISCHUCK B E, MERKEL S T, DEUTSCH I H. Control of inhomogeneous atomic ensembles of hyperfine qubits[J]. Physical Review A, 2012, 85 (2): 022302.  
 [9] LI J S. Ensemble control of finite-dimensional time-varying linear systems [J]. IEEE Transactions on Automatic Control, 2011, 56(2): 345-357.  
 [10] RUTHS J, LI J S. Optimal control of inhomogeneous ensembles [J]. IEEE Transactions on Automatic Control, 2012, 57(8): 2021-2032.  
 [11] BEAUCHARD K, DA SILVA P S P, ROUCHON P. Stabilization for an ensemble of half spin systems[J]. Automatica, 2012, 48(1): 68-76.  
 [12] CHEN C L, DONG D Y, LONG R X, et al. Sampling-based learning control of inhomogeneous quantum ensembles[J]. Physical Review A, 2014, 89 (2): 023402.  
 [13] CHEN C L, DONG D Y, QI B, et al. Quantum ensemble classification: A sampling-based learning control approach [J]. IEEE transactions on neural networks and learning systems, 2017, 28(6): 1345-1359.  
 [14] VANDERSYPEN L MK, CHUANG I L. NMR techniques for quantum control and computation[J]. Reviews of Modern Physics, 2005, 76(4): 1037.  
 [15] KOBZAR K, LUY B, KHANEJA N, et al. Pattern pulses: Design of arbitrary excitation profiles as a function of pulse amplitude and offset[J]. Journal of Magnetic Resonance, 2005, 173(2): 229-235.  
 [16] PAULY J, ROUX P L, NISHIMURA D, et al. Parameter relations for the shinnar-le Roux selective excitation pulse design algorithm (NMR imaging)[J]. IEEE Transactions on Medical Imaging, 1991, 10(1): 53-65.