

开放量子系统状态最优跟踪控制的研究

黄泽霞^{1,2} 黄德才³ 俞攸红⁴

(浙江工业大学信息学院 杭州 310023)¹ (绍兴文理学院元培学院信息与电子系 绍兴 312000)²
(浙江工业大学计算机科学与技术学院、软件学院 杭州 310023)³ (浙江工业大学理学院 杭州 310023)⁴

摘要 利用 Liouville 超算符变换方法,对伴随着耗散的开放量子系统状态演化的方程进行精简,并在最优控制的基础上,利用随时间变化的密度函数来设计性能指标,提出了一种高效的单调收敛的最优跟踪控制方法。此方法可以使系统在实数空间中沿给定时间变化的轨迹运动,并控制其随时间变化的布居数。同时,在 MATLAB 环境下以两能级开放量子系统为例,对这种方法进行了实验仿真,分析了不同惩罚因子 α 的变化与选取对系统性能的影响。

关键词 Liouville 超算符,开放量子系统,最优跟踪控制

中图分类号 TP13 **文献标识码** A

Optimal Tracking Control of Population Transfer in Open Quantum Systems

HUANG Ze-xia^{1,2} HUANG De-cai³ YU You-hong⁴

(College of Information Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310023, China)¹

(Department of Information and Electronic, Shaoxing University Yuanpei College, Shaoxing 312000, China)²

(College of Computer Science and Technology, School of Software, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310023, China)³

(College of Science, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310023, China)⁴

Abstract In order to control the open quantum systems with dissipation, we simplified the process of treating with the dynamics of open quantum systems using Liouville superoperator form. For this system, we proposed an efficient, monotonical convergent optimal tracking control method according to a special performance indicator which was designed based on the optimal control theory and the time-dependent density. This method can drive the time-dependent density along a given time-dependent trajectory in real space and control the time-dependent occupation numbers. We simulated the control process in MATLAB, and analyzed the influence of different penalty factors on system performance.

Keywords Liouville superoperator, Open quantum system, Optimal tracking control

1 介绍

量子控制是将经典控制理论和现代控制方法应用于量子系统上,实现对量子系统状态的操控。根据控制的不同目的,量子控制论可大致细分为反馈控制^[1]、最优控制^[2-6]和跟踪控制^[7,8]等。量子最优控制就是确定控制场从而使选定的性能指标最优,早在 20 世纪 80 年代中后期就受到了研究者的重视,1988 年 Rabitz 等^[9]对量子系统最优控制问题解的存在性、数学近似处理方法和最优控制的应用做了详细的论述,为量子系统最优控制问题的研究奠定了基础。随后,科学家们将量子最优控制理论应用到不同的化学、物理系统的控制中。通常,一个量子最优控制问题包括目标函数的选择和最优控制解的求取两个最重要的步骤。

到目前为止,大多数研究者选取的控制目标函数都是与时间无关的。例如,文献[10]提出以欧拉-拉格朗日方程来确定控制场包络线的算法,此算法适用于非常简单的量子系统;

文献[11,12]中提出跟踪控制算法。这种算法在理论上取得了巨大的成功,但其本身存在着难以克服的困难:必须有一个给定的路径,且此路径要能在实际中利用激光场实现,否则会导致在控制场中出现奇点。在实际中,需要靠直觉来给出一个期望路径,但此期望路径很难给定。

基于文献[12,13]对封闭量子系统讨论的结果,本文进一步研究和挖掘这一思想在开放量子系统中的应用,提出一种新颖的最优跟踪控制(Optimal Tracking Control,简称 OTC)方法。此新方法针对开放量子系统,利用随时间变化的控制目标函数找到沿预先定义的轨迹尽可能接近的最优控制场,即,实际的路径能实时最优跟踪期望轨迹。这种单调收敛的新方法与文献[10]和文献[11,12]两种方法的区别在于:此方法不仅仅适用于两能级系统,且在选择合适控制目标时也不需依赖于人的直觉。

本文第 2 节是建立伴随耗散的开放量子系统的动力学方程;第 3 节引入最优跟踪控制策略;第 4 节在 MATLAB 环境

到稿日期:2013-02-19 返修日期:2013-07-01 本文受国家自然科学基金项目(10774131)资助。

黄泽霞(1977—),女,博士生,讲师,主要研究方向为量子智能控制研究,E-mail:huangzexia@yahoo.com.cn;黄德才(1958—),男,教授,博士生导师,主要研究方向为算法设计与分析、人工智能、图像处理等;俞攸红(1962—),女,副教授,主要研究方向为量子光学、量子计算等。

下利用最优跟踪控制策略对开放量子系统进行系统仿真及分析,考察惩罚因子 α 取值与控制时间 t 的长短、布居数转移概率的大小的关系;最后是总结。

2 开放量子系统的动力学方程

封闭量子系统不再处于理想的绝对零度,或与外界环境等有了相互作用时,就成为一个开放量子系统。其模型与封闭量子系统遵循的 Schrödinger 方程密切相关。一般认为开放量子系统模型是在 Schrödinger 方程的基础上增加了耗散项。

系统与环境相互作用时,会发生两类耗散:相位松弛和布居数松弛。由此,相位松弛和布居数松弛改变了系统的状态演化:

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)] + L_D[\rho(t)] \quad (1)$$

式中, $L_D[\rho(t)]$ 是由松弛速率决定的耗散(超)算符。耗散(超)算符的第二种标准型为 Lindblad 首先给出的耗散动力学生成子的标准型:

$$L_D[\rho(t)] = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N^2-1} r_j ([V_j \rho(t), V_j^\dagger] + [V_j, \rho(t) V_j^\dagger]) \quad (2)$$

系统的总哈密顿可以分解为: $H = H_0 + \sum_{m=1}^M f_m(t) H_m$, 此时,受控耗散系统的动力学方程^[14]可写为:

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_0, \rho(t)] - \frac{i}{\hbar} \sum_{m=1}^M f_m [H_m, \rho(t)] + L_D[\rho(t)] \quad (3)$$

开放量子系统状态的演化微分方程(3)是一个复杂的矩阵微分方程,因此很难求解出系统状态的表达式。为了简化式(3)的求解,按列堆垛,将 $N \times N$ 的密度矩阵 $\rho(t)$ 重写为 $1 \times N^2$ 的列向量,记为 $|\rho(t)\rangle\rangle$,取 $\hbar=1$,则式(3)可写成下面 Liouville 超算符形的形式:

$$\frac{d}{dt} |\rho(t)\rangle\rangle = (-iL_H + L_D) |\rho(t)\rangle\rangle \quad (4)$$

式中, L_H 和 L_D 分别为表示动力学的哈密顿部分和耗散部分的 $N^2 \times N^2$ 矩阵。

3 最优跟踪控制策略

量子最优控制是量子控制的重要方向之一,通常是选择一个恰当的目标函数,通过求解目标函数的极值来获得最优控制解。在经典最优控制理论中,一般选取量子系统的激发态作为期望态 ρ_c ,它是与时间无关的常量。若考虑对控制场能量的限制,则系统的性能指标可以设定为被控状态到达目标状态的期望值,即:

$$J = \text{Re}[\text{Tr}\{\rho_{ar}^\dagger \rho_c\}] - \alpha \int_0^{t_f} [\epsilon(t') - \epsilon_0(t')]^2 dt' \quad (5)$$

式中,参数 α 反映控制场的权值大小, $\epsilon(t)$ 代表最优控制场, $\epsilon_0(t)$ 代表初始控制场。由式(5)可知,性能指标 J 的物理意义取决于期望状态的选择。

在本文中,我们提出一种新的单调收敛的最优控制方法,通过此方法可以使量子态尽可能接近沿预先定义的随时间变化的期望轨迹运动。我们把此新方法定义为最优跟踪控制

(Optimal Tracking Control,简称 OTC)方法。

OTC 方法是一种在最优控制思想的基础上,利用与时间相关的期望密度矩阵 $\rho_{ar}(t) = \begin{pmatrix} a^2(t) & 0 \\ 0 & b^2(t) \end{pmatrix}$ (满足 $a^2(t) + b^2(t) = 1$),选取与时间相关的期望值函数 $\text{Re}[\text{Tr}\{\rho_{ar}(t) + \rho_c\}]$,求取系统性能指标最优的控制方案。也就说 OTC 方法只要在容许控制场里给定一个与时间相关的期望值密度矩阵 $\rho_{ar}(t)$,就可以根据开放量子系统状态的演化微分方程(4)求出最优控制场,使得系统状态布居数的变化尽可能接近期望值密度矩阵。由此,经典最优控制理论中的性能指标就改为下面的形式:

$$J = \text{Re}[\text{Tr}\{\rho_{ar}(t) + \rho_c\}] - \alpha \int_0^{t_f} [\epsilon(t') - \epsilon_0(t')]^2 dt' \quad (6)$$

式中, ρ_c 为开放量子系统的实际量子态。

4 数值仿真与分析

4.1 仿真模型

以二能级开放量子系统为例,得到系统动力学方程的 Liouville 超算符形为:

$$\frac{d}{dt} |\rho(t)\rangle\rangle = (-iL_H + L_D) |\rho(t)\rangle\rangle \quad (7)$$

其中,

$$(-iL_H + L_D) = \begin{bmatrix} -\gamma_{21} & i\epsilon_x - \epsilon_y & -i\epsilon_x - \epsilon_y & \gamma_{12} \\ i\epsilon_x + \epsilon_y & -2i\omega - \Gamma_{12} & 0 & -i\epsilon_x + \epsilon_y \\ -i\epsilon_x + \epsilon_y & 0 & 2i\omega - \Gamma_{12} & i\epsilon_x - \epsilon_y \\ \gamma_{21} & -i\epsilon_x + \epsilon_y & i\epsilon_x + \epsilon_y & -\gamma_{12} \end{bmatrix}$$

令 $\hat{\Lambda}(t) = (-iL_H + L_D)$,则方程(7)可以变成 $\frac{d}{dt} |\rho(t)\rangle\rangle = \hat{\Lambda}(t) |\rho(t)\rangle\rangle$,此方程的解可以写成 $|\rho(t)\rangle\rangle = \hat{G}(t) |\rho(0)\rangle\rangle$ 的形式,由此可得到 $\hat{G}(t)$ 和 $\hat{\Lambda}(t)$ 之间的关系式:

$$\frac{\partial \hat{G}(t)}{\partial t} = \hat{\Lambda}(t) \hat{G}(t), \hat{G}(0) = \hat{I}_{4 \times 4} \quad (8)$$

根据文献[15]可以得到系统仿真实验中控制算法的仿真过程如下:

1. 选定初始控制场 $\epsilon_0(t)$;
2. 迭代次数 $k=1$ 时, $\epsilon^{(1)}(t) = \epsilon_0(t)$;
3. 利用式(8),求出 $\hat{G}^{(k)}(t)$,可得到 $\hat{G}^{(k)}(t_f), \rho^{(k)}(t_f)$;
4. 利用 $J = \text{Re}[\text{Tr}\{\rho_{ar}(t) + \rho_c\}] - \alpha \int_0^{t_f} [\epsilon(t') - \epsilon_0(t')]^2 dt'$,可求出 $J^{(k)}$;当 $k \geq 2$ 时,计算 $\Delta J = J^{(k)} - J^{(k-1)}$,如果 $\Delta J \leq 0.0001$ 则退出循环,否则继续;

5. 利用 $\frac{d}{dt} |\Xi(t)\rangle\rangle = (-iL_H + L_D)^+ |\Xi(t)\rangle\rangle$,求 $|\Xi^{(k)}(t)\rangle\rangle$,其中 $|\Xi(t)\rangle\rangle$ 为拉格朗日乘子密度;

6. 利用公式

$$\epsilon^{(k+1)}(t) = \epsilon^{(k)}(t) + \frac{1}{2\lambda(t)} \text{Im}[\text{Tr}\{\langle\langle \Xi^{(k)}(t) | \frac{\partial \hat{\Lambda}(t)}{\partial \epsilon(t)} | \hat{G}^{(k+1)}(t) \rangle\rangle\}]$$

求出 $\epsilon^{(k+1)}(t)$;

7. 重复(3)-(6)。

4.2 算法与分析

在 MATLAB 环境下用式(7)所描述的二能级开放量子系统的 Liouville 超算符求解系统状态,利用如上所写的仿真步骤,对系统状态的演化过程进行了控制系统的仿真实验。在系统仿真实验中,我们着重通过调节控制场的惩罚因子 α 来考量系统的布居数转移概率的大小。仿真实验中,采样周期设为 $\Delta t=0.01$ 。在满足 $a^2(t)+b^2(t)=1$ 的前提下,选定与

$$\text{时间相关的期望矩阵 } \rho_{\text{tar}}(t) = \begin{pmatrix} \sin^2(\omega t) & 0 \\ 0 & \cos^2(\omega t) \end{pmatrix}.$$

为了说明惩罚因子 α 取值对于布居数的影响,我们绘制了不同 α 取值时的布居数转移曲线,如图 1 所示。其中, α 选取了 0.01, 0.1, 1, 5 不同的 4 个值。

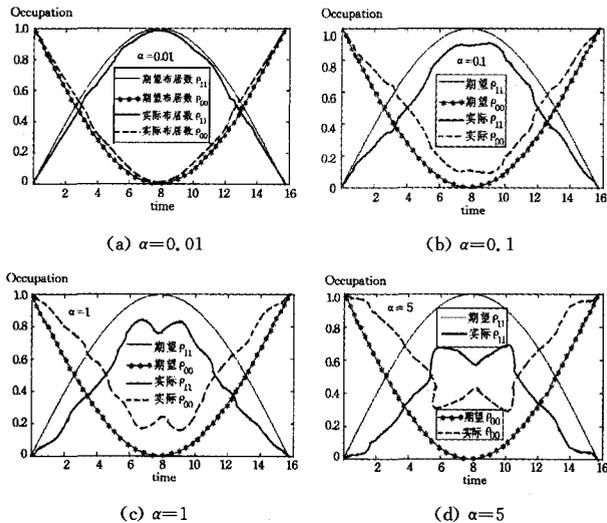


图 1 不同 α 取值情况下,布居数转移概率 ρ_{00} 和 ρ_{11} 随时间变化的曲线

从数值仿真曲线中可以看出以下几点:1)惩罚因子 α 越小,控制性能就越好,布居数转移率的跟随性能越强。特别是当 α 取 0.01 时,布居数转移曲线与越接近期望的转移轨迹几乎一致;2)随着惩罚因子 α 的变大实际转移率曲线出现了“突变点”,并且惩罚因子的值越大,“突变点”的变化越明显;3)惩罚因子 α 与布居数最大时的最短时间有关,随着 α 变大,最短时间从 $\alpha=0.01$ 时的 7.89s 变为 $\alpha=5$ 时的 5.93s。

根据惩罚因子和性能指标之间的关系,利用仿真实验绘制了性能指标从 0 到 1 时,惩罚因子 α 的变化情况,如图 2 所示。在最大的控制场内,随着惩罚因子 α 的变大,系统性能变差,最优化后的轨迹越来越偏离期望的轨迹。

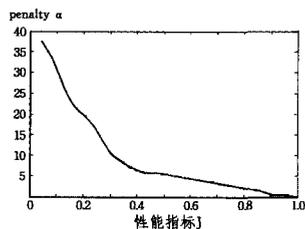


图 2 惩罚因子 α 与性能指标的关系

结束语 本文对利用 Liouville 超算符变换后的开放量子系统,以系统被控状态到达随时间变化的目标状态的期望

值为性能指标,进行了系统仿真实验,讨论了系统的最优跟踪控制性能。通过实验结果可以看出,采用本文所提方法对两能级开放量子系统的状态进行跟踪控制,惩罚因子 α 越小,性能指标越好,跟踪控制效果越明显,布居数转移率越接近 1,得到的状态转移结果越理想。另外,当惩罚因子 α 超过 1 时,布居数转移率曲线会出现“突变点”,即,惩罚因子 α 过高使得布居数转移变得不可控。

参考文献

- [1] Kuang Sen, Cong Shuang. Lyapunov control methods of closed quantum systems [J]. Automatica, 2008, 44(1): 98-108
- [2] Hwang B, Goan H-S. Optimal control for non-Markovian open quantum systems [J]. Physical Review A, 2012, 85: 032321
- [3] Palao J P, Kosloff R, Koch C P. Protecting coherence in Optimal Control Theory: state dependent constraint approach [J]. Physical Review A, 2008, 77(6): 063412(11)
- [4] Lapert M, Zhang Y, Braun M, et al. Singular extremals for the time-optimal control of dissipative spin 1/2 particles [J]. Physical Review Letters, 2010, 104(8): 083001-083004
- [5] Castro A, Gross E K U. Acceleration of quantum optimal control theory algorithms with mixing strategies [J]. Physical Review E, 2009, 79(5): 056704-056710
- [6] Ohtsuki Y, Turinici G, Rabitz H. Generalized monotonically convergent algorithms for solving quantum optimal control problems [J]. The Journal of Chemical Physics, 2004, 120: 5509
- [7] Ho T-S, Rabitz H. Accelerated monotonic convergence of optimal control over quantum dynamics [J]. Physical Review E, 2010, 82: 026703
- [8] Paulo E M F Mendonça, Gilchrist A, et al. Optimal tracking for pairs of qubit states [J]. Physical Review A, 2008, 78: 012319
- [9] Peirce A P, Dahleh M, Rabitz H. Optimal control of quantum mechanical systems: Existence, numerical approximation, and applications [J]. Physical Review A, 1988, 37(12): 495024964
- [10] Grigorenko I, Garcia M E, Bennemann K H. Theory for the optimal control of time-averaged quantities in quantum systems [J]. Physical Review Letters, 2002, 89: 233003
- [11] Zhu W, Rabitz H. Quantum control design via adaptive tracking [J]. The Journal of Chemical Physics, 2003, 119: 3619
- [12] Sugawara M. General formulation of locally designed coherent control theory for quantum system [J]. The Journal of Chemical Physics, 2003, 118: 6784
- [13] Serban I, Werschnik J, Gross E K U. Optimal control of time-dependent targets [J]. Physical Review A, 2005, 71: 053810
- [14] Schirmer S G, Solomon A I. Constraints on relaxation rates for N-level quantum systems [J]. Physical Review A, 2004, 70(2): 2107-2119
- [15] Maximov I I, Tošner Z, Nielsen N C. Optimal control design of NMR and dynamic nuclear polarization experiments using monotonically convergent algorithms [J]. The Journal of Chemical Physics, 2008, 128: 184505