

DOI: 10.3969/j.issn.1007-5461.2024.01.010

热噪声环境下的量子调控优化

刘学铭, 陈永聪*, 敖平

(上海大学理学院, 上海 200444)

摘要: 环境热噪声是量子计算走向规模化的一大阻碍, 其存在对量子调控过程的鲁棒性和保真度提出了更高要求。采用随机动力学结构分解方法, 并根据 Kubo-Einstein 涨落耗散定理, 研究了热噪声环境下量子调控的量子动力学优化问题, 即如何提高热噪声环境下量子调控过程的保真度。基于二维球面上的经典路径可完全描述单个量子比特运动这一特性, 提出了基于梯度下降算法的变分优化方案, 并通过数值模拟证明了该方案的可用性。结果发现, 在经典极限下影响量子调控过程保真度的主要因素是热涨落。该方法有望与实验相互验证, 进一步指导和评估实验方案, 以期实现量子门的高保真度。

关键词: 量子信息; 量子调控; 量子比特; 噪声环境; 优化过程

中图分类号: O413.1 文献标识码: A 文章编号: 1007-5461(2024)01-00103-10

Quantum control optimization in thermal noise environment

LIU Xueming, CHEN Yongcong*, AO Ping

(College of Sciences, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

Abstract: Thermal noise presents a major obstacle for quantum computing to scale up, and its existence puts stricter requirements on the robustness and fidelity of quantum control process. This work adopts the stochastic dynamic structure decomposition method and applies the Kubo-Einstein fluctuation dissipation theorem to the optimization of quantum dynamics, that is, how to improve the fidelity of quantum control process under thermal noise environment. Based on the characteristic that the classical path on a two-dimensional sphere can completely describe the motion of a single qubit, the research proposes a variational optimization scheme of gradient descent algorithm to reduce the thermal effect, and demonstrates its applicability via numerical simulation. It is found that the main factor affecting the fidelity of quantum control process under classical limit is thermal fluctuation. The method is expected to be mutually validated with experiments, and thus can further guide and evaluate experimental schemes towards achieving high fidelity of quantum gates.

Key words: quantum information; quantum control; qubit; noisy environment; optimization process

基金项目: 国家自然科学基金 (563 16Z103060007)

作者简介: 刘学铭 (1996 -), 江苏江都人, 研究生, 主要从事量子控制方面的研究。E-mail: lxmon@foxmail.com

导师简介: 敖平 (1963 -), 重庆人, 博士, 教授, 博士生导师, 主要从事宏观量子物体的耗散运动、凝聚态中拓扑缺陷的运动和癌症的发生发展机制等方面的研究。E-mail: aoping@sjtu.edu.cn

收稿日期: 2022-03-25; 修改日期: 2022-05-30

*通信作者。E-mail: chen Yongcong@shu.edu.cn

0 引言

量子计算机是量子信息处理的重要应用领域之一。目前,实现通用量子计算机的物理系统候选主要有以约瑟夫森结为基础的超导量子电路^[1-3]、光学系统^[4,5]和离子阱系统^[6,7]等,其中超导量子电路在设计和制备等方面与现今的集成电路技术之间兼容性较高,具有较强的设计灵活性和可操控性,极具规模化的潜力,但该方案依然面临环境噪声的阻碍。在理想封闭系统中,量子比特的演化是确定的,如果知道它的初始状态和哈密顿量就可以预测任意时刻的状态,但是现实世界中的量子系统是开放量子系统,在低温情况下依旧存在噪声,系统间的相互耦合也不可避免,这便会导致量子退相干^[8]现象的发生以及降低操作量子比特的保真度。因此,量子纠错^[9,10]对量子计算的大规模应用至关重要,同时也要求在热噪声环境下能够更精确地调控量子比特的演化。

近年来,对量子动力学及量子最优控制的理论研究已有许多进展。绝热捷径^[11]使用了无跃迁量子驱动方法^[12],可用于加速绝热过程及量子控制,该方法与文献^[13]的工作不谋而合。在量子最优控制领域,GRAPE^[14]及Krotov方法^[15]已经被广泛使用,GRAPE是基于梯度优化的算法,实用性强,但原则上只能找出局部解,且性能容易受到系统模型的随机或确定性错误的影响^[16],Krotov方法相对GRAPE方法则具有随迭代次数单调增长,无需线性搜索等优点^[17],但也更为复杂,这些方法都可用于非马尔可夫环境的量子控制优化^[18,19]。量子动力学的传统主流研究方法一般采用概率Lindblad主方程^[20]及算子和表示^[21,22]来研究开放量子系统的退相干和量子耗散现象。然而Lindblad主方程实质上遵循马尔可夫过程,会忽视系统与热库耦合引起的记忆效应,因此无法解决如低温下量子有色噪声中的滞后等问题^[23,24]。

本文从单个量子比特的调控理论出发,研究了热噪声环境下的量子动力学问题,并基于文献^[13]对操作量子比特本征态的研究,展现了一个可用于优化量子调控过程,提高操作量子比特保真度的方案。该方案有望能够进一步推广,从完全量子力学的角度进行证明,以此提供一个评估热噪声环境下量子调控过程的通用框架,并且有望得到实验验证,从而进一步指导实验,实现量子计算高保真度量子门。

1 噪声环境下的量子调控理论

1.1 单个量子比特的量子调控

首先考虑单个量子比特模型,一般可用一个两能级系统来描述,如磁场中的自旋1/2粒子^[25],其哈密顿量可表示为

$$\hat{H}_s = -\frac{1}{2} [\mathbf{B}(t) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{B}_0(t) \hat{I}] , \quad (1)$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 是泡利矩阵, \hat{I} 是一个 2×2 的单位矩阵, $\mathbf{B}(t)$ 和 $\mathbf{B}_0(t)$ 是与系统耦合的含时控制场。对于该系统处于某个时刻 t 的量子态 $|\Psi(t)\rangle$,可以用布洛赫球面(Bloch sphere)上的三个欧拉角来表示,量子态 $|\Psi(t)\rangle$ 的形式可表示为

$$|\Psi(t)\rangle = \exp(-i\gamma/2) \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \exp(-i\phi/2) \\ \sin(\theta/2) \exp(+i\phi/2) \end{bmatrix} , \quad (2)$$

其中变量分别为极角 $\theta(t)$,方位角 $\phi(t)$ 和一个整体的相位 $\gamma(t)$,均是依赖于时间的函数。并且,极角 θ 和方位

角 ϕ 确定了布洛赫球面上的平均自旋矢量, 可表示为

$$\mathbf{n}(t) = \langle \Psi(t) | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \Psi(t) \rangle = (n_x, n_y, n_z) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) , \quad (3)$$

这里的平均自旋矢量 \mathbf{n} 也被称作布洛赫矢量, 其演化遵循标准的薛定谔方程

$$\dot{\mathbf{n}}(t) = \mathbf{n}(t) \times \mathbf{B}(t) / \hbar , \quad (4)$$

方程 (4) 也被称为布洛赫方程 (Bloch equation)。由于布洛赫矢量的演化等价于量子态 $|\Psi(t)\rangle$ 在布洛赫球面上的运动, 所以可以用经典意义下的球面上的轨迹来表示量子态 $|\Psi(t)\rangle$ 在布洛赫球面上的演化。

对于量子态 $|\Psi(t)\rangle$ 的任意演化, 都可以使用逆向工程方法^[13,26,27]来获得调控量子态演化所需的控制外场 $\mathbf{B}(t)$ 和 $\mathbf{B}_0(t)$, 其形式为

$$\begin{cases} B_x(t)/\hbar = +\dot{\theta} \sin \phi + (\dot{\phi} + B_z/\hbar) \tan \theta \cos \phi \\ B_y(t)/\hbar = -\dot{\theta} \cos \phi + (\dot{\phi} + B_z/\hbar) \tan \theta \sin \phi \\ \dot{\gamma}(t) = -B_0/\hbar - (\dot{\phi} + B_z/\hbar) / \cos \theta \end{cases} . \quad (5)$$

(5) 式表明量子比特的量子态可以由一对具有整体相位 $-\gamma/2$ 的平面场调控, 并且可以通过 $B_z(t)$ 和 $B_0(t)$ 来进一步调节, 其中整体相位依赖于量子态演化的路径。

1.2 环境的影响

这里定义量子态的态矢量 $X \equiv (\theta, \phi)^\dagger$, 方程 (4) 即为这个态矢量的经典动力学方程。为了简化问题, 令 $\mathbf{B}_0 = 0$, 并进一步引入系统势能

$$H_0(\theta, \phi, \mathbf{B}) = \langle \Psi(t) | \hat{H}_s | \Psi(t) \rangle = -\frac{1}{2} \mathbf{B}(t) \cdot \mathbf{n}(t) , \quad (6)$$

于是量子态的演化方程可改写为

$$A \dot{X}(t) = -\nabla_X H_0(\theta, \phi, \mathbf{B}(t)) , \quad (7)$$

其中 $\nabla_X = (\partial_\theta, \partial_\phi)^\dagger$, A 是一个 2×2 的反对称矩阵, 定义为

$$A \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & \sin \theta \\ -\sin \theta & 0 \end{bmatrix} , \quad (8)$$

它是一个横向矩阵, 类似于电磁场中的洛伦兹力, 而方程 (7) 则是运动方程的随机动力学结构分解^[28]的无噪声形式。

在此关注的是量子调控问题中环境的影响, 接下来将对环境的影响作进一步分析。对于热相互作用的情况, 环境的影响会引起控制场 $\mathbf{B}(t)$ 具有一个高斯涨落

$$\mathbf{B}(t) \rightarrow \mathbf{B}(t) + \boldsymbol{\xi}(t) , \quad (9)$$

其中 $\boldsymbol{\xi}(t)$ 是一个三分量的随机场, 表示随机热噪声, 其方差具有马尔可夫性, 可表示为

$$\langle \xi_j(t) \xi_{j'}(t') \rangle = [2\delta(t-t') k_B T] \delta_{jj'} \eta_j , \quad (j, j' = x, y, z) , \quad (10)$$

式中: $\delta(t)$ 是狄拉克 δ 函数, η_j 为粘滞系数, 表示热接触力的强度, k_B 是玻尔兹曼常量, T 是环境温度。实际上, 随机场 $\boldsymbol{\xi}(t)$ 的存在相当于在方程 (7) 的右边增加一个随机噪声矢量, 形式为

$$\zeta(t) = \frac{1}{2} \nabla_x [\mathbf{n}(t) \cdot \xi(t)] , \quad (11)$$

并且它的方差可写为

$$\langle \zeta(t) \zeta^\dagger(t') \rangle_\xi = [2\delta(t-t') k_B T] \times \mathbf{S} , \quad (12)$$

式中 \mathbf{S} 是一个对称半正定的 2×2 矩阵, 对应于随机动力学结构分解中的耗散矩阵^[28], 在此可以看作 (θ, ϕ) 的扩散矩阵。对于典型的开放系统, 可以根据久保-爱因斯坦涨落耗散定理知道涨落总是伴随着耗散^[29]。因此可以在方程 (7) 的左边增加一项 $S\dot{X}$ 进行修正, 也就是涨落和耗散的环境影响导致确定性的量子态演化方程 (7) 变成一个含有随机项的随机运动方程

$$(\mathbf{S} + \mathbf{A}) \dot{X} = -\nabla_x H_0(\theta, \phi, \mathbf{B}(t)) + \zeta(t, \theta, \phi) , \quad (13)$$

式中 \mathbf{S} 是之前提到的耗散矩阵, \mathbf{A} 为横向矩阵, 该方法详见文献[28,30]对该方法的讨论。而方程 (13) 即为量子调控问题的随机动力学方程形式, 它为单量子比特的调控问题提供了一种经典的可视化图像, 使量子比特的运动可以用布洛赫球面上的"经典"轨迹来描绘, 而在纯粹的量子力学系统中并不存在类似图像。

2 量子调控过程的优化

2.1 欧姆耗散

以费米环境中的欧姆热库为例^[31], 进一步展示量子调控的优化过程。首先, 欧姆热库可表示为

$$J_j(\omega) = \eta_j \omega \exp(-|\omega|/\omega_c) , \quad (14)$$

式中 ω_c 是其谱函数的一些截断值, 而环境的影响则可以归类到此组耗散谱中。

在此, 主要研究由热噪声所贡献的热涨落的情况, 于是对方程 (13) 做进一步修正, 引入一个"绝热"项, 所以方程 (13) 中的势能变为

$$H = H_0 - \sum_j \left(\frac{\eta_j \omega_c}{4\pi} \right) n_j^2 , \quad (15)$$

这是为了抵消 $\mathbf{n}^2 = 1$ 的整体相位的绝热效应, 所以方程 (13) 改写为

$$(\mathbf{S} + \mathbf{A}) \dot{X} = -\nabla_x \left[H_0(\theta, \phi, \mathbf{B}) - \sum_j \left(\frac{\eta_j \omega_c}{4\pi} \right) n_j^2 \right] + \zeta(t, \theta, \phi) , \quad (16)$$

式中 $\zeta(t, \theta, \phi)$ 的具体形式为

$$\zeta(t) = \begin{bmatrix} \zeta_1(t) \\ \zeta_2(t) \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \zeta_x(t) \cos \theta \cos \phi + \zeta_y(t) \cos \theta \sin \phi + \zeta_z(t) \sin \theta \\ -\zeta_x(t) \sin \theta \sin \phi + \zeta_y(t) \sin \theta \cos \phi \end{bmatrix} , \quad (17)$$

这是由方程 (11) 得到的, 而新的随机运动方程, 即方程 (16) 中的耗散矩阵 \mathbf{S} 的形式为

$$\mathbf{S} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} \eta_x \cos^2 \theta \cos^2 \phi + \eta_y \cos^2 \theta \sin^2 \phi + \eta_z \sin^2 \theta & (\eta_y - \eta_x) \sin(2\theta) \sin(2\phi)/4 \\ (\eta_y - \eta_x) \sin(2\theta) \sin(2\phi)/4 & \eta_x \sin^2 \theta \sin^2 \phi + \eta_y \sin^2 \theta \cos^2 \phi \end{bmatrix} . \quad (18)$$

(17) 式和 (18) 式满足广义的久保-爱因斯坦关系。

2.2 量子调控的优化问题

接下来将演示如何调控一个量子态 $\Omega(t)$ 在热噪声环境下从初态演化到终态。首先, 在布洛赫球面上, 从一个初始态 X_i 到目标态 X_f 的光滑路径的运动方程如方程 (4) 所示, 对其使用逆向工程可以得到控制外场 $\mathbf{B}(t)$ 和 $B_0(t)$ 的形式, 如方程组 (5) 所示, 为了简化问题, 令 $B_z(t)$ 和 $B_0(t)$ 都为 0。

在外场的调控下, 量子态从初态演化为终态, 但由于环境耦合的存在, 实际的终态与目标态会存在一个由涨落造成的偏差 \tilde{X} , 其形式可以表示为随机场 $\zeta(t)$ 的积分

$$\tilde{X}(t_f, t_i) = \int_{t_i}^{t_f} A^{-1}(\theta(t), \phi(t)) \zeta(t) dt . \quad (19)$$

在上式中, 为方便计算, 忽略了一些绝热项和耗散项的高阶修正项, 而 $\int_{t_i}^{t_f} A^{-1}(\theta(t), \phi(t)) dt$ 和 $\int_{t_i}^{t_f} \zeta(t) dt$ 的值都是确定的, 后面可以通过改变轨迹来调节。回到方程 (19), 偏差 \tilde{X} 的加权均方差在“经典”热极限的情况下, 即 $k_B T \geq \hbar \omega_c$ 时, 其形式为

$$\langle \tilde{X}^\dagger W \tilde{X} \rangle_\xi = (2k_B T) \int_{t_i}^{t_f} dt \text{Tr} \{ \mathbf{W}(t_f) \mathbf{D}[\theta(t), \phi(t)] \} , \quad (20)$$

这里的 \mathbf{D} 是传统意义上的扩散矩阵, 它与 (18) 式中的 \mathbf{S} 矩阵有关, 可表示为

$$\mathbf{D} = -A^{-1} \mathbf{S} A^{-1} , \quad (21)$$

而 \mathbf{W} 则是一个权重矩阵, 它与终态 $\Omega(t_f)$ 的角变量 θ 和 ϕ 有关, 可表示为

$$\mathbf{W}(t_f) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sin^2 \theta(t_f) \end{bmatrix} . \quad (22)$$

至此, 可以看出, 要想减小环境与系统耦合的影响, 就要最小化方程 (20) 的值, 而这可以通过选择合适的控制外场 $\mathbf{B}(t)$ 来实现。

2.3 初始轨迹

首先, 构造一条光滑的初始轨迹来进行优化, 假设它满足

$$\dot{\theta}(t_i) = \dot{\theta}(t_f) = \dot{\phi}(t_i) = \dot{\phi}(t_f) = 0 , \quad (23)$$

这条初始轨迹以布洛赫球面上的点 (θ_i, ϕ_i) 为起点, 经过一段时间 $T_s = t_f - t_i$ 到达终点 (θ_f, ϕ_f) , 于是在满足该条件的情况下, 可以进一步设 $\theta(t)$ 为

$$\theta(t) = \theta_i + \frac{1}{2} (\theta_f - \theta_i) \left[1 - \cos \frac{\pi(t - t_i)}{T_s} \right] , \quad (24)$$

此时, $\phi(t)$ 的选择依赖于 $\theta(t)$ 在何时穿过布洛赫球面上的“赤道”, 这种情况会发生在初态 $\Omega(t_i)$ 和终态 $\Omega(t_f)$ 处于布洛赫球面的不同半球上的时候。可以将 $\theta(t_c) = \pi/2$ 作为条件, 代入方程 (24), 即可得到“穿越”时刻 t_c 的值。

接下来进一步讨论如何穿过“赤道”, 本研究的解决方法是: 如果 t_c 存在, 即初态 $\Omega(t_i)$ 与终态 $\Omega(t_f)$ 处于不同半球上时, 则令 $\dot{\phi}(t_c) = 0$ 来克服轨迹在穿越“赤道”时, 方程组 (5) 中 $\tan \theta$ 趋于无穷大, 出现发散的情况。于是 $\phi(t)$ 将被分为两个部分

$$\phi(t) = \phi_i + \frac{1}{2}(\phi_c - \phi_i) \left[1 - \cos \frac{\pi(t-t_i)}{t_c-t_i} \right] \quad (t_i \leq t < t_c) , \quad (25)$$

$$\phi(t) = \phi_c + \frac{1}{2}(\phi_f - \phi_c) \left[1 - \cos \frac{\pi(t-t_c)}{t_f-t_c} \right] \quad (t_c \leq t \leq t_f) , \quad (26)$$

在上两式中, ϕ_c 的形式可设为

$$\phi_c = \phi_i + (\phi_f - \phi_i) \left[\frac{t_c - t_i}{t_f - t_i} \right] . \quad (27)$$

这样就得到了一条光滑的初始轨迹, 接下来将对这条初始轨迹进行优化。

2.4 傅里叶分量

在此前已经得到了控制场的具体形式 (5) 式, 但是该控制场在实验中是难以实现的。在实验中一般存在许多物理限制, 其中一个可能的限制因素是傅里叶分量的数量, 如果模拟该控制场所需求的傅里叶分量数较多, 会对实验操作造成巨大困难, 难以精确调控。这里可以通过先计算控制场的傅里叶分量来解决此问题, 这里依然令 $B_z = 0$, 得到傅里叶分量的形式为

$$B_{j,n} = \frac{2}{T_s} \int_{t_i}^{t_f} B_j(t) \sin \frac{n\pi(t-t_i)}{T_s} dt , \quad (j=x, y) , \quad (28)$$

因此, 控制场 $B_j(t)$ 可以进一步近似为

$$B_j(t) = \sum_{n=1}^N B_{j,n} \sin \frac{n\pi(t-t_i)}{T_s} , \quad (29)$$

式中 N 为傅里叶分量的数量。在有限的傅里叶分量数的情况下, 即 N 足够小时, 可以将 $B_{j,n}$ 作为可调参数来进一步执行优化过程。

2.5 优化方案

本节将介绍如何通过调整轨迹或控制场来获得最佳保真度。首先, 设列向量 \mathbf{x} 为 $\{B_{j,n}\}$ 的 $2N$ 维参数空间中的一个点, 并将方程 (20) 整合到一个代价函数中, 用来寻找最佳的轨迹, 代价函数形式如下

$$U(\mathbf{x}) = \left[1 - \left| \langle \Omega(t_f) | \Omega_f \rangle \right|^2 \right] , \quad (30)$$

其中 Ω_f 是在量子调控过程中预设的目标态, 并且 $\langle \Omega(t_f) | \Omega_f \rangle$ 的具体形式为

$$\langle \Omega(t_f) | \Omega_f \rangle = \cos \frac{\theta(t_f)}{2} \cos \frac{\theta_f}{2} \exp \left\{ \frac{i}{2} [\phi(t_f) - \phi_f] \right\} + \sin \frac{\theta(t_f)}{2} \sin \frac{\theta_f}{2} \exp \left\{ \frac{i}{2} [\phi_f - \phi(t_f)] \right\} , \quad (31)$$

该代价函数表示与完全保真度 (保真度为 1) 的偏差。由于涨落的存在, 要进一步考虑噪声所引起的偏差 $\tilde{X}(t_i, t_f)$, 于是将代价函数修正为

$$\langle U(\mathbf{x}) \rangle_{\xi} = \left\{ 1 - \left| \langle \Omega(t_f) | \Omega_f \rangle \right|^2 \exp \left[-\langle \tilde{X}^\dagger W \tilde{X} \rangle_{\xi} / 4 \right] \right\} , \quad (32)$$

式中 $\langle \tilde{X}^\dagger W \tilde{X} \rangle_{\xi}$ 的值由方程 (20) 给出, 而因子 $1/4$ 是为了匹配 $|\langle \Omega | \Omega' \rangle|^2$ 在 $\Omega - \Omega'$ 处的二阶泰勒展开。

接下来将对轨迹做进一步优化, 优化方法选择梯度下降法。首先根据方程 (29) 得到预设初始轨迹经傅里叶变换后的控制场的傅里叶分量, 将其作为优化的起点, 进一步执行优化过程, 优化迭代的递推公式为

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - y_k \nabla_x U(\mathbf{x}_k), \quad (33)$$

式中步长系数 y_k 由 Barzilai-Borwein 方法^[32]确定

$$y_k = \frac{\left| (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1})^\dagger [\nabla_x U(\mathbf{x}_k) - \nabla_x U(\mathbf{x}_{k-1})] \right|}{\left\| \nabla_x U(\mathbf{x}_k) - \nabla_x U(\mathbf{x}_{k-1}) \right\|^2}. \quad (34)$$

执行完优化过程后即可得到一组"最佳"控制场参数, 这些参数对应于一条最优量子态运动轨迹, 即在有限的 N 个傅里叶分量数的限制下, 量子态沿该轨迹运动时, 噪声影响最小, 最终保真度最高。

3 数值计算与讨论

本节依然以欧姆热库为例, 展示量子调控优化的数值计算过程和结果。首先, 量子调控过程的时间尺度很大程度上取决于 \hbar 与基准温度 T_B 的相互影响, 在数值计算中, 令 $\hbar = 1$, 且 $k_B T \sim \hbar \omega_c \gg k_B T_B$ ($k_B T_B = 1$), 这表明在 $T_B = 1$ K 时, 时间变量 t 的单位是 $\hbar / (k_B T_B) \sim 10^{-11}$ s。这里 $\hbar \gg \eta$, 所以要求粘滞系数 η 值很小从而来实现较长的相干时间, 取 $\hbar \omega_c = 5$, $k_B T = 5$, $T_s = 5$ 来做数值计算。

接下来确定量子态的初态和目标态, 设初态为布洛赫球面上一点 $(\pi/4, \pi/6)$ (即 $\theta_i = \pi/4, \phi_i = \pi/6$), 目标态为 $(7\pi/8, 4\pi/3)$, 根据方程 (24)、(25)、(26)、(27) 可以得到一条初始光滑的量子态运动轨迹 p_0 , 及其穿过"赤道"的位置 $(\pi/2, \phi_{c0})$, $\phi_{c0} = -0.6176$, 其代价 $c_0 = 0.0598$, 以该轨迹为基准进行优化。基于变分法的思想, 在初态和终态确定的情况下, 可以通过改变量子态的运动轨迹来寻找量子态沿不同轨迹运动的最小代价, 这是由方程 (32) 所确定的, 这里通过改变 ϕ_c 的值来得到不同轨迹, 如图 1 所示, 其中 $\phi_c \in [\phi_i, \phi_f]$ 。图 2 则展示了量子态沿不同轨迹运动的代价随 ϕ_c 变化的趋势, 从图中可以看出, 代价随 ϕ_c 的变化呈现出涨落现象, 由此可以得到一条代价最小的轨迹 p_1 及其对应的 ϕ_{c1} , 经过数值计算, 量子态沿 $\phi_{c1} = 0$ 时, 其轨迹的代价 $c_1 = 0.0491$ 最小。

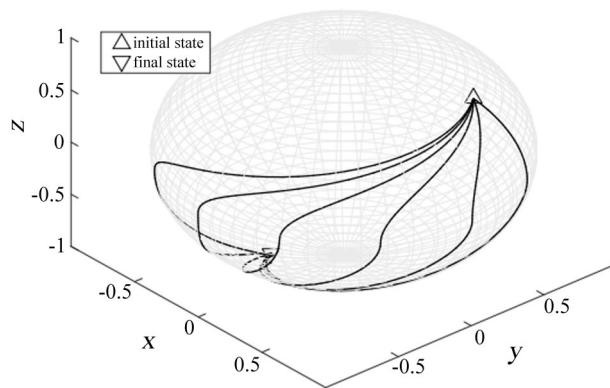


图 1 不同 ϕ_c 所确定的量子态的运动轨迹, 其中 $\phi_c \in [\phi_i, \phi_f]$

Fig. 1 Trajectories of quantum state motion with different ϕ_c where $\phi_c \in [\phi_i, \phi_f]$

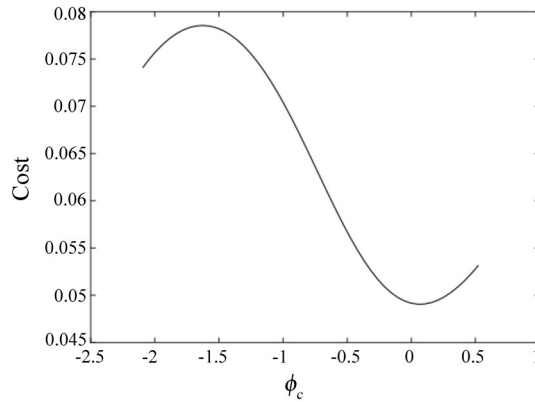


图2 量子态沿不同轨迹运动的代价随 ϕ_c 的变化趋势

Fig. 2 Cost of different trajectories vary with ϕ_c

接下来对轨迹 p_1 做傅里叶变换, 求出其傅里叶分量, 此处令傅里叶分量数 $N=2$ 。将求得的傅里叶分量 $B_{j,n}$ 作为初值, 进一步使用梯度下降法进行优化, 优化的目标函数为代价函数, 如方程 (32) 所示, 最终得到一组控制场的傅里叶分量, 该组分量即对应一条最优量子态运动轨迹 p_2 , 将该轨迹与基准轨迹 p_0 和变分优化轨迹 p_1 进行对比, 如图3所示。不同轨迹各自的代价分别为 $c_0=0.0598$, $c_1=0.0491$, $c_2=0.0465$, 从图中可以直观地观察到不同轨迹之间的区别。根据不同轨迹各自的代价, 即与保真度为1的偏差, 可以发现该优化方案在逐步提高调控过程的保真度。最终优化后的轨迹 p_2 相较于初始轨迹 p_0 的保真度提升约为22.2%。

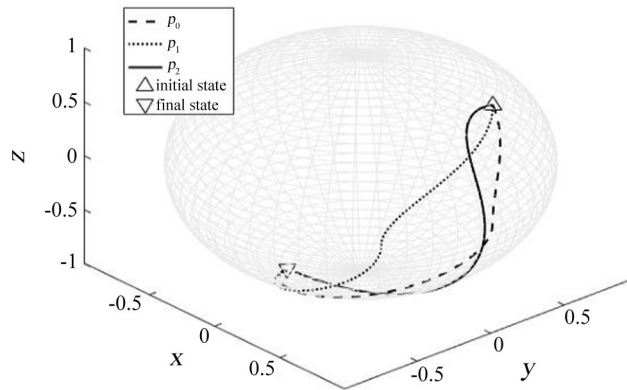


图3 初始轨迹 p_0 、变分优化轨迹 p_1 和梯度下降法优化轨迹 p_2 的对比, 它们的代价分别为 $c_0=0.0598$, $c_1=0.0491$, $c_2=0.0465$

Fig. 3 Comparison of initial trajectory p_0 , trajectory with variational optimization p_1 and trajectory with gradient descent algorithm optimization p_2 , and their costs are $c_0=0.0598$, $c_1=0.0491$, $c_2=0.0465$ respectively

通过进一步分析代价函数, 发现影响保真度的主要因素是热涨落。在代价函数中, 平方项 $\left| \langle \Omega(t_f) | \Omega_f \rangle \right|^2$ 为耗散项, 表示系统耗散对完全保真度的影响, 而指数项 $\exp\left(-\langle \tilde{X}^\dagger W \tilde{X} \rangle_\xi / 4\right)$ 为涨落项, 表示热涨落对完全保真度的影响。在本节数值计算中的参数条件下, 优化轨迹 p_2 耗散项的值为0.9994, 涨落项的值为0.9540, 涨落项对代价的贡献远大于耗散项对代价的贡献, 这表明涨落项对最终保真度的影响更大, 即影响调控过程保真度的主要因素是热涨落。

4 结 论

采用随机动力学结构分解方法研究了热噪声环境下的量子比特的调控优化问题, 并使用久保-爱因斯坦涨落耗散定理构造出可用于分析噪声环境下的量子调控问题的随机动力学方程, 且进一步分析了如何减小环境对调控过程的影响从而提高调控过程的保真度。根据量子调控问题的随机动力学方程, 给出了一个基于梯度下降算法的变分优化方案, 并通过数值计算证明该方案可有效提高调控过程的保真度。根据代价函数的定义和数值计算过程中的数值变化, 发现在经典热极限的情况下, 影响保真度的主要因素为热涨落。在本方案中, 来自潜在环境的绝热、耗散和随机效应之间具有明确关系, 可以直观地展示这些方面的环境影响。该方案的另一个优点就是可以在布洛赫球面上轻松描绘出量子比特的运动轨迹, 实现量子比特运动的"经典"可视化, 这个优点可用于进一步探究量子比特运动与保真度的关系, 但是该特性目前只适用单量子比特的情况。

同时, 本工作展示的是在热噪声环境下初始态和目标态已知的量子调控优化问题, 但是实验场景中的初始态是任意的, 量子逻辑门的形式是已知的, 该问题可以转化为如何调控么正变换。为此可以通过扩大参数空间来解决, 首先随机取一系列初始态, 并扩大参数空间, 即增加傅里叶分量数进行优化, 直到最终所得目标参数对这一系列初始态同时实现优化效果, 即可达到调控么正变换的目的; 本工作的结果可尝试推广至绝对零温极限下, 用于探究量子噪声对调控过程的影响, 包括由量子耗散所引起的非马尔可夫效应, 而目前的主流方法 Lindblad 主方程则无法计算; 该方法可进一步运用到多量子比特体系, 将量子纠缠对调控过程的影响也考虑进来; 本方案将来可与实验相互检验佐证, 或者用"影响泛函"方法进行验证, 然后用来评估指导量子调控的实验方案。这些研究点未来可进一步探索发展。

参考文献:

- [1] Wendin G. Quantum information processing with superconducting circuits: A review [J]. *Reports on Progress in Physics*, 2017, 80(10): 106001.
- [2] Arute F, Arya K, Babbush R, *et al.* Quantum supremacy using a programmable superconducting processor [J]. *Nature*, 2019, 574(7779): 505-510.
- [3] Paik H, Schuster D I, Bishop L S, *et al.* Observation of high coherence in Josephson junction qubits measured in a three-dimensional circuit QED architecture [J]. *Physical Review Letters*, 2011, 107(24): 240501.
- [4] Zhong H S, Wang H, Deng Y H, *et al.* Quantum computational advantage using photons [J]. *Science*, 2020, 370(6523): 1460-1463.
- [5] Arrazola J M, Bergholm V, Brádler K, *et al.* Quantum circuits with many photons on a programmable nanophotonic chip [J]. *Nature*, 2021, 591(7848): 54-60.
- [6] Bruzewicz C D, Chiaverini J, McConnell R, *et al.* Trapped-ion quantum computing: Progress and challenges [J]. *Applied Physics Reviews*, 2019, 6(2): 021314.
- [7] Blatt R, Roos C F. Quantum simulations with trapped ions [J]. *Nature Physics*, 2012, 8(4): 277-284.
- [8] Kim Y S, Lee J C, Kwon O, *et al.* Protecting entanglement from decoherence using weak measurement and quantum measurement reversal [J]. *Nature Physics*, 2012, 8(2): 117-120.

- [9] Roffe J. Quantum error correction: An introductory guide [J]. *Contemporary Physics*, 2019, 60(3): 226-245.
- [10] Reed M D, DiCarlo L, Nigg S E, *et al.* Realization of three-qubit quantum error correction with superconducting circuits [J]. *Nature*, 2012, 482(7385): 382-385.
- [11] Guéry-Odelin D, Ruschhaupt A, Kiely A, *et al.* Shortcuts to adiabaticity: Concepts, methods, and applications [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2019, 91(4): 045001.
- [12] Berry M V. Transitionless quantum driving [J]. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2009, 42(36): 365303.
- [13] Emmanouilidou A, Zhao X G, Ao P, *et al.* Steering an eigenstate to a destination [J]. *Physical Review Letters*, 2000, 85(8): 1626-1629.
- [14] Khaneja N, Reiss T, Kehlet C, *et al.* Optimal control of coupled spin dynamics: Design of NMR pulse sequences by gradient ascent algorithms [J]. *Journal of Magnetic Resonance*, 2005, 172(2): 296-305.
- [15] Konnov A I, Krotov V F. On global methods for the successive improvement of control processes [J]. *Avtomatika i Telemekhanika*, 1999(10): 77-78.
- [16] Wu R B, Chu B, Owens D H, *et al.* Data-driven gradient algorithm for high-precision quantum control [J]. *Physical Review A*, 2018, 97(4): 042122.
- [17] Eitan R, Mundt M, Tannor D J. Optimal control with accelerated convergence: Combining the Krotov and quasi-Newton methods [J]. *Physical Review A*, 2011, 83(5): 053426.
- [18] Hwang B, Goan H S. Optimal control for non-Markovian open quantum systems [J]. *Physical Review A*, 2012, 85(3): 032321.
- [19] Rebentrost P, Serban I, Schulte-Herbrüggen T, *et al.* Optimal control of a qubit coupled to a non-Markovian environment [J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102(9): 090401.
- [20] Manzano D. A short introduction to the Lindblad master equation [J]. *AIP Advances*, 2020, 10(2): 025106.
- [21] Omkar S, Srikanth R, Banerjee S. The operator-sum-difference representation of a quantum noise channel [J]. *Quantum Information Processing*, 2015, 14(6): 2255-2269.
- [22] Nielsen M A, Chuang I L. *Quantum Computation and Quantum Information* [M]. 10th Anniversary Edition. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2010.
- [23] Benedetti C, Paris M G A, Maniscalco S. Non-Markovianity of colored noisy channels [J]. *Physical Review A*, 2014, 89: 012114.
- [24] Bhattacharya S, Chaudhury P, Chattopadhyay S, *et al.* Directed motion in a periodic potential of a quantum system coupled to a heat bath driven by a colored noise [J]. *Physical Review E*, 2008, 78(2): 021123.
- [25] Alshcher A, Grabert H. Semiclassical dynamics of a spin- $\frac{1}{2}$ in an arbitrary magnetic field [J]. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 1999, 32(26): 4907-4919.
- [26] Ran D, Shan W J, Shi Z C, *et al.* Pulse reverse engineering for controlling two-level quantum systems [J]. *Physical Review A*, 2020, 101(2): 023822.
- [27] Wu Q C, Chen Y H, Huang B H, *et al.* Reverse engineering of a nonlossy adiabatic Hamiltonian for non-Hermitian systems [J]. *Physical Review A*, 2016, 94(5): 053421.
- [28] Ao P. Potential in stochastic differential equations: Novel construction [J]. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2004, 37(3): L25-L30.
- [29] Kubo R. The fluctuation-dissipation theorem [J]. *Reports on Progress in Physics*, 1966, 29(1): 255-284.
- [30] Kwon C, Ao P, Thouless D J. Structure of stochastic dynamics near fixed points [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2005, 102(37): 13029-13033.
- [31] Chen Y C. Theory of quantum dynamics in Fermionic environment: An influence functional approach [J]. *Journal of Statistical Physics*, 1987, 47(1): 17-55.
- [32] Barzilai J, Borwein J M. Two-point step size gradient methods [J]. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 1988, 8(1): 141-148.