文章编号: 1000−8152(2012)03−0273−09

基于李雅普诺夫量子系统控制方法的状态调控

从 爽

(中国科学技术大学 自动化系, 安徽 合肥 230027)

摘要: 从多方面对基于李雅普诺夫的量子系统控制方法进行了系统深入地研究, 包括该方法与最优控制的关系; 李雅普诺夫函数与性能指标之间的关系; 几种常用李雅普诺夫函数下的控制所能解决的问题, 适用范围和所存在的问题等. 在此基础上, 结合量子系统本身所具有的特点, 分别针对本征态, 叠加态和混合态的制备与调控目标, 总结出多种不同控制问题的改进方案. 对不同改进方案的设计思想, 所能解决的问题, 物理意义及其适用范围等进行剖析, 系统化了一套基于李雅普诺夫稳定性理论对量子系统进行状态调控的设计方法.

关键词: 量子系统; 李雅普诺夫方法; 纯态; 混合态; 状态调控

中图分类号: TP273 **文献标识码**: A

State manipulation in Lyapunov-based quantum system control methods

CONG Shuang

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

Abstract: We investigate in depth the Lyapunov-based quantum control methods including the relation between the Lyapunov-based control and the optimal control, the Lyapunov function and the performance index, the range of application and the existing problems. Combining our results with intrinsic properties of quantum system, we develop several control schemes with improvements for different objectives such as the regulation of eigenstates, superposition state or mixed state. The design ideas, the physical significance and the range of suitable applications are analyzed. The designs method employing Lyapunov stability theorem in controlling quantum system is systemized.

Key words: quantum system; Lyapunov method; pure state; mixed state; state ragulation

1 引言(Introduction)

随着纳米技术与纳米制作工艺技术的提高, 以及量子效应如量子信息处理新应用兴趣的增长, 使得量子现象的控制在很多不同的研究领域包括量子计算、量子化学、纳米级材料及波色–爱因斯坦凝聚态等方面正在得到极大的关注, 引起世界范围的广泛兴趣. 将宏观领域中的系统控制理论延伸到量子领域, 或将系统控制的思想扩展到不受控于经典定律而由量子效应控制的物理系统, 在最近的10年里逐步成为一个重要的交叉学科的研究领域. 量子系统控制方法及其技术也已经成为国际科技界的一个前沿研究方向. 量子控制理论是宏观世界中的经典和现代控制理论对微观世界中的量子系统的应用. 所研究的问题主要是从系统论和控制论的观点探讨量子系统状态和轨迹的调控及其演化. 量子控制方法是从系统控制的角度, 利用控制理论结合量子系统所具有的特点, 对量子状态调控及其轨迹跟踪设计出可以实现的外加控制律的方法. 如何根据量子系统本身所具有的特点, 开发出适合量子系统的控制理论与方法一直是人们努力追求的目标. 到目前为止, 在量子系统控制理论的研究中, 可控性问题已受到了大量的关注并取得了相当的研究成果, 特别是对于有限维封闭量子系统的可控性研究较为成熟. 在系统可控的前提下, 如何设计出合适的控制律以实现期望的控制任务则是量子控制理论的另一重要研究方向. 与宏观世界中被控系统的状态不同, 量子系统的状态及其应用涉及到制备和调控具有特殊存在形式的状态, 例如, 在化学反应的分子动力学中, 为了能有效控制产物形成的选择性, 人们需要对相应的分子系统进行主动控制: 借助激光辐射的强度和相位来操纵系统的布居数, 使之从分子系统的某一初始基态以高概率转移并稳定在一个指定的激发态上, 实现对期望反应产物的选择性控制. 在量子计算中, 利用辐射诱导原子和分子的激发, 并由此驱动微观运动以生成指定目标态上的布居转移就是一种运算操作, 尤其是完全的布居转移可以用来制备

收稿日期: 2011−02−01; 收修改稿日期: 2011−08−17.
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61074050); 高等院校博士学科点专项科研基金资助项目(20103402110044).

一个初始纯态, 而量子并行运算的快速性是依赖于量子系统所独特具有的相干性, 也就是叠加态的运算. 在量子保密通讯的应用中, 所用到的最关键的量子状态就是纠缠态. 所有这些量子状态的制备、调控和保持都是一个量子控制理论和方法所需要解决的问题. 最后, 一个完整的量子控制理论必须对其控制方法所能达到的精度进行理论分析. 在此方面, 量子控制理论与宏观系统也有所不同: 由于量子系统是对不确定的几率进行控制, 只要是误差不为零的稳定控制, 就意味着可能是100%的达不到控制目标. 这就提出了一个苛刻的要求: 任何一个可达的量子控制方法必须保证是误差为零的收敛控制. 综上所述, 一个量子控制理论的成形, 必须在有能力对具有特殊需求的各种量子状态调控的同时, 设计出收敛的量子控制律.

到目前为止, 已经发展出不少量子控制方法和技术. 最简单的是脉冲动力学方案, 它是利用共振单光子跃迁或者相应的共振双光子的拉曼(Raman)跃迁, 通过控制脉冲面积来建立相干态. 它可以实现两级系统布居的完全翻转, 该调控技术的缺点是难以精确控制激发脉冲的强度和持续时间. 在基于绝热背景的理论研究方面, 也提出和实现了一些量子调控技术, 例如: 啁啾绝热通道(CHIRAP)技术和受激拉曼绝热通道(STIRAP)技术. 在CHIRAP和STIRAP技术中, 诸如频率或振幅包络之类的激光参数的调整极其缓慢, 以满足系统的跃迁只沿着绝热定义的缀饰态进行. 这一设计方案的目的是实现到达期望本征态的完全布居转移, 因而把这些理论用于更一般的要求对叠加态或混合态的量子状态的控制将是相当困难的. 更进一步的量子控制方案是基于测量的量子反馈控制方法. 这一方法中所涉及到的测量问题是用测量算符来描述的. 不过一般量子系统中测量算符的可实现性以及实现的困难度一直以来是基于测量的量子反馈控制理论所面临的一个严峻问题. 在现有的量子控制方法中, 应用最成功的应当是基于宏观系统中的最优控制理论(OCT)的量子最优控制技术. 它是将一个状态调控问题转变成一个全局优化问题. 在这一控制技术中, 不含时间的性能指标的定义比较灵活, 因此可以用于多种优化问题. 但是, 基于OCT的量子最优控制的主要缺点是: 所要解决的优化问题是一个"两点边值问题", 系统状态及其伴随状态的运动方程都依赖于未知的控制场, 人们只有从猜测控制场开始, 通过不断的迭代来完成控制场的设计与优化. 这不仅需要大量的数值计算, 而且极大地限制了对于复杂量子系统以及需要快速响应的量子物理控制问题的应用. 能够避免迭代, 设计相对简单并可实现实时反馈控制的量子控制方法就是最近10年内被引入到量子系统控制中的基于李雅普诺夫的量子控制方法.

纵观量子李雅普诺夫方法的研究历程, 可以将其分为两个阶段: 第1个阶段为物理、化学领域的一些学者对量子李雅普诺夫方法的应用. 他们常常将此方法称为局部(优化的)控制方法[1–2]. 为了专门的控制目的, 他们已经将该方法成功用于了许多具体的量子调控的问题中, 例如: pump-dump类型的反应控制、异构化、分裂反应控制等. 在这些具体问题的研究中, 量子态控制的目标主要集中在高效实现一个激发本征态的布居分布上, 此外也包括通过实验或仿真实验尝试实现量子系统的布居分布、路径转移、波包成形等具体任务. 由于这些研究的重点在于对外加控制的设计方面, 而对于最终的状态控制或控制效果上缺乏理论上的分析和保证, 因此对于不同的系统无法判定和确保期望的最终控制效果的实现. 实际上, 即使仅通过系统仿真实验, 也能够容易地发现, 采用基于李雅普诺夫的量子控制方法设计出的控制律, 并不能100%的保证控制目标的实现. 这是因为该方法是一种仅仅保证系统稳定的控制方法, 而量子系统的几率控制这一特殊的自身性质, 恰恰要求必须采用收敛的控制方法. 这就导致了第2阶段的研究: 系统控制与数学领域中的学者对基于李雅普诺夫的量子控制方法的研究[3–17], 其研究的重点放在从理论上分析系统状态演化的收敛性或状态稳定化问题上, 为物理、化学领域的学者在这一方法具体应用的可达性上提供了理论上的分析依据. 其中: 对于完全确定的李雅普诺夫函数, Mirrahimi等人[8]在纯态模型以及假定目标态是本征态的前提下, 利用不变原理论证了系统状态演化对于目标态的渐近稳定性与围绕本征态处的线性化系统的可控性的等价性, 提出了线性化系统不可达的情形下利用绝热演化对于目标本征态的渐近跟踪方法; Altafini[10–11]和剑桥大学Schirmer研究组[12–13]则针对密度算符描述的系统模型, 分别利用动力系统理论和不变原理重点分析了闭环系统的任意状态的收敛性问题. 国内, 本文作者所在研究组也一直致力于基于李雅普诺夫的量子控制方法的研究[14−19], 不但提出了完全确定的量子李雅普诺夫函数下不借助外加扰动实现理想系统两个本征态间转移的控制律设计方法[4], 而且提出了带有附加自由度的李雅普诺夫控制方法, 并论证和比较了当前出现过的几种纯态量子李雅普诺夫函数下的稳定化效果[15]. 基于李雅普诺夫的方法还设计出无需迭代的量子系统最优控制[16]、制备出叠加态[17]、提出最优纯态的量子控制策略[18]、针对对角型李雅普诺夫函数, 利用不变集原理提出了保证系统收敛的控制方案[19].

与宏观控制系统相似, 笔者认为量子控制系统也分为两大类: 状态转移控制与轨迹跟踪. 在量子系统的状态转移调控中, 又可细分为纯态控制和一般态控制. 针对每一种控制问题都已经产生出多种不同的控制策略. 而每一种控制策略都具有自己的特性, 即适用范围及其局限性. 有计算量大小、求解及其实现难易以及控制性能上的差异. 所以一个完整的量子系统控制过程实际上是一个选择合适的模型以及合适的控制策略来达到期望目标的过程, 这就要求设计者熟悉多种不同模型及其相关控制策略的特点. 为此, 本文专门对已经提出的几个具有代表性的基于李雅普诺夫量子控制方法的特点进行分析综合以及性能对比的研究. 基于李雅普诺夫方法控制的最大优势就是避免迭代求解, 不需要求解被控系统的偏微分方程, 直接根据李雅普诺夫第二(间接)稳定性定理来获得调控系统状态的控制律. 这就使得极快速的量子控制有可能实现. 一般而言对一个系统进行控制器的设计, 其前提是该系统必须是可控的, 否则对于任何系统输入其系统输出状态都将发散, 无论采用何种理论或方法对其进行控制器设计都是徒劳的. 因此, 在对任何系统进行控制器设计之前, 需要对被控系统的可控性进行研究, 即先弄清楚被控系统是否可控. 系统可控性条件就是其研究成果. 可控性研究的主要作用(或功能)就是给人们提供了方便的判断被控系统是否可控的条件准则, 仅此而已, 它不参与任何控制器的设计. 另一方面, 从系统控制的角度来研究问题, 由某个系统控制理论所设计出的控制器能够使用的基本条件是: 在此控制器的作用下, 整个控制系统应当是稳定的; 如果控制系统不但稳定而且是收敛的, 则说明在此控制器的作用下, 系统的跟踪误差可达到0值. 由于稳定性只能保证系统的跟踪误差落在某个允许的小的范围内, 所以稳定性不保证收敛性, 而收敛的系统一定是稳定的. 从系统控制的角度来看, 一个控制系统是否为反馈(或闭环)控制, 主要取决于所设计出的控制律的表达式是否是被控系统输出状态的函数, 如果控制律是系统输出状态的函数就是反馈控制, 没有就是一个开环控制. 所以在量子系统控制中, 就控制系统结构图来分类也分为开环控制系统和闭环控制系统两大类. 反馈控制是一种典型的闭环控制. 实际上, 利用宏观控制理论所设计出的量子系统反馈控制律也可以通过基于模型的数学表达式计算出系统的输出状态, 并设计出相应的反馈控制律. 这种基于模型的状态反馈控制的前提是被控系统的状态确实能够按照模型进行演化, 这意味着被控系统是一个封闭量子系统, 因为该情况下从模型获得系统状态与实际被控系统输出是一致的. 封闭量子系统是指与外界没有相互作用的理想量子系统. 虽然所有的量子系统的实现都涉及到开放量子系统, 但很多量子系统的实验由于其控制作用是在瞬间完成, 与被控系统相互作用的控制时间与消相干相比可以忽略不计, 系统的动力学演化被认为满足薛定谔方程或刘维尔方程. 另一方面, 在开放量子系统中, 比较重要的控制方法之一也是通过构造一个具有封闭量子系统特性的无消相干子空间来设计控制器. 正是因为如此, 与宏观控制系统中线性、定常、时不变的理想系统是最基本的被控系统一样, 封闭量子系统的控制也是开放量子系统控制的基础, 是首先必须研究透的量子系统的控制. 本文所研究是封闭量子系统中的基于李雅普诺夫的控制方法.

2 量子系统的状态驱动和轨迹跟踪问题 (State steering and trajectory problems in quantum systems)

2.1 量子被控系统模型的描述(Description of controlled system modeling)

与宏观系统控制的方式相似, 在量子系统控制中, 可以有多种描述被控系统模型和控制问题的方式. 系统模型可以采用薛定谔方程或刘维尔方程. 具体到某个被控系统是采用哪种模型表示, 应取决于所要解决的控制问题. 相对于刘维尔方程, 采用波函数作为变量的薛定谔方程相对简单, 但它只能对纯态进行调控, 不能对混合态进行调控. 而采用密度矩阵作为变量的刘维尔方程没有此限制. 考虑双线性哈密顿量的控制系统

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = -\mathrm{i}[\hat{H}_0 + \sum_{m=1}^{M} f_m \hat{H}_m, \hat{\rho}(t)], \tag{1}$$

其中: $\hat{H}_0$是系统(自由)内部哈密顿量, $\hat{H}_m$是(控制)外部哈密顿量, 假定$\hat{H}_0$与$\hat{H}_m$均独立于时间; $f_m(t)$是一个允许的外部控制场, 它是实数. 为了简单起见, 取普朗克常数$\hbar = 1$, 而将其忽略.

一个哈密顿系统的演化是幺正的. 一个纯态幺正控制问题常常用希尔伯特空间的波函数所遵循的薛定尔方程的演化来描述为

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = -\mathrm{i}(\hat{H}_0 + \sum_{m=1}^{M} f_m \hat{H}_m)|\psi\rangle. \tag{2}$$

当对系统状态在纯态之间进行调控时, 波函数所描述的式(2)等价于采用密度算符描述形式, 因为有$\hat{\rho}(t) = |\psi\rangle\langle\psi|$. 但是式(2)不适用于混合态, 这也是式(2)的适用范围. 需要指出的是, 尽管可以将系统模型(2)看作模型(1)的一种特殊情况, 但在具体的研究中, 纯态情况下往往可以得到一些更为直观, 简洁的结论, 且时常可以为模型(1)的研究提供一些启发性的思路.

2.2 量子系统控制问题的描述(Description of control problems in quantum systems)

从系统控制的角度来看, 根据系统控制理论设计出控制律的最大优势就在于: 可以通过理论来设计控制律并确定其中的所有参数而不是靠实验调节来获得最优控制律, 使控制系统的实验获得最佳控制效果, 因此对实际系统实验具有指导意义. 从这个意义上来说, 控制律的设计最终都可以归结到寻求最佳控制参数的问题上. 这在量子系统科学工程中存在许多挑战: 1) 一般情况下这不是一个凸优化问题; 2) 寻优空间往往是无限维的: 控制范围被定义在区间$[0, t_\mathrm{f}]$, 也可能是无限的$[0, \infty)$区间; 3) 计算量极大, 因为涉及到偏微分方程的求解; 4) 系统被控模型常为非标准形式, 很难求解; 5) 系统被控模型的精度不够.

减少无限维寻找空间的途径之一就是通过控制参数来得到一个有限维里的控制解. 这也是最常用的处理手段, 对应的控制方案就是采用“平滑常数函数逼近”. 参数化控制场的一般形式为

$$f(t) = \sum_{m=1}^{M} a_m \cos(\omega_m t + \phi_m),$$

其中: 控制参数a_m, ω_m和ϕ_m就是需要通过系统控制理论进行优化的参数.

量子系统最典型的控制问题是: 设计一组控制函数$f_m(t)(m = 1, \cdots, M)$使系统状态从一个给定的初始态转移到一个期望的目标态. 在量子系统控制中, 常称为状态驱动或状态制备, 也可以统称为状态调控. 此时, 期望到达的目标态是固定的: ψ_f或ρ_f. 状态驱动的类型可以分别是纯态和一般态.

从系统控制的角度来说, 对一个系统状态的调控, 一般是指所设计出的控制律能够完成从任意初态驱动到期望的目标态, 并能够最终稳定在该目标态上的控制. 结合量子系统本身的特性, 对量子系统状态的控制问题, 从严格意义上来说, 仅能够稳定到系统的稳态, 也就是本征态. 对于系统的非稳态的调控, 只能说将目标态稳定在其自行演化的轨道上.

更进一步, 如果期望的目标态不仅仅是一个固定的纯态, 而是一个随时间变化的函数, 此时只能采用密度矩阵表示的刘维尔方程来描述. 这里又可分为两种情况: 一是目标态是一个自由演化方程, 满足$\dot{\rho}_\mathrm{f}(t) = -\mathrm{i}[H_0, \rho_\mathrm{f}(t)]$, 另一种情况是目标态为一个随时间变化的任意函数: $\rho_\mathrm{f}(t) = f(t)$.

量子系统一般的控制问题是: 设计一组控制函数$f_m(t)(m = 1, \cdots, M)$使系统从其初始状态ρ_0收敛到期望的目标态ρ_f. 既然一个哈密顿系统的演化是幺正的, 所以其状态$\rho(t)$的频谱是时不变的, 或等价于$\mathrm{tr}\,[\rho^n(t)] = \mathrm{tr}\,[\rho_0^n(t)]$, $\forall n \in 1, \cdots, N$. 因此为了保证目标态$\rho_\mathrm{f}$的可达性, 必须要求$\rho_0$与$\rho_\mathrm{f}$具有相同的频谱(或熵), 且系统是密度矩阵可控. 如果ρ_0与ρ_f的熵不同, 可以通过最小化它们之间的距离$\|\rho(t) - \rho_\mathrm{f}(t)\|$来达到目标.

可以分析出, 只要ρ_f与$\hat{H}_0$是对易的, 即$[\hat{H}_0, \rho_\mathrm{f}(0)] = 0$成立, 那么$\rho_\mathrm{f}$就是固定的. 因此量子态的控制问题对大多数目标态而言, 就是一个状态调控问题. 而对于非固定目标态$\rho_\mathrm{f}(t)$的控制问题就是轨迹跟踪问题: 寻找一个控制$f(t)$使初始态ρ_0的轨迹在外加控制作用下的演化渐进收敛到一个目标轨迹$\rho_\mathrm{f}(t)$上. 在量子系统的状态跟踪中, 可能涉及到轨迹跟踪与轨道跟踪问题. 有人认为$\rho(t)$本身是个轨迹, 而目标态ρ_f运行在自身的一个轨道上. 轨道上的路径在量子态上表现出的是全局相位, 其变化对态的幅值没有影响, 所以在状态控制过程中一般不予以考虑. 轨迹$\rho(t)$是一个随时间变化的函数, 是控制律可以影响的被控量.

3 基于李雅普诺夫量子控制方法的特性分析(Characteristic analysis of Lyapunov-based quantum control method)

现实世界中的实际系统往往是复杂的、非线性的, 大多数情况下很难精确解出表征系统动力学特性的非线性方程的解. 系统控制理论是根据一些数学上可以使用的分析工具, 在不需要对其进行精确求解的情况下, 仅通过对这些非线性被控系统的行为及其动力学特性进行分析来获得控制系统的信息.

基于李雅普诺夫控制的基本思想是: 基于李雅普诺夫有关的稳定性定理, 对于一个自治的动力学量子系统$X = f(x)$, 构造一个李雅普诺夫函数$V(x)$: 它是一个定义在相空间$\varOmega = (x)$上的可微标量函数, 且$\forall x \in \varOmega$, 有$V(x) \geqslant 0$. 利用确保系统稳定性的条件$\dot{V}(x) \leqslant 0$, 来求解此式成立情况下系统的控制律. 所以基于李雅普诺夫控制方法设计的关键是李雅普诺夫函数$V(x)$的构造. 因为如果$V(x)$构造的不合适, 得不到$\dot{V}(x) \leqslant 0$, 则设计失败. 只要能够构造出一个$V(x) \geqslant 0$, 同时能够得到$\dot{V}(x) \leqslant 0$, 就能够成功的设计出一个基于李雅普诺夫方法的控制律. 必须强调的是, 从系统控制理论的角度来看李雅普诺夫稳定性定理所给出的条件只是一个充分条件, 不是必要条件, 换句话说, 找不到合适$V(x) \geqslant 0$, 使$\dot{V}(x) \leqslant 0$, 不能说系统就一定不稳定, 最多只能说基于李雅普诺夫的设计方法对该系统不适用.

在量子系统控制中, 李雅普诺夫函数的选取主要有3种[19]:

1) 状态距离[20]

$$V_1 = (1 - |\langle\psi_\mathrm{f}|\,\psi\rangle|^2). \tag{3}$$

2) 状态投影(平均值)[21]

$$V_2 = \langle \psi | P | \psi \rangle. \tag{4}$$

3) 状态误差[14]

$$V_3 = \langle \psi - \psi_{\mathrm{f}} | \psi - \psi_{\mathrm{f}} \rangle. \tag{5}$$

系统控制理论告诉我们: 对于稳定量子系统其状态轨迹的路径朝系统能量下降方向移动并停止在能量的极小值上. 李雅普诺夫函数实际上就是一种能量函数. 由于该方法引入李雅普诺夫函数$V(x)$, 且在保证系统稳定条件下的控制设计是通过求李雅普诺夫函数对时间的一阶导数并令$\dot{V}(x)=0$来求得控制律, 其方法等价于构造一个与李雅普诺夫函数相同的性能指标, 通过求其最小情况下的控制函数. 从这个角度上说, 基于李雅普诺夫方法的控制就是一种最优控制, 这就是李雅普诺夫函数与最优控制性能指标之间的关系. 知道了李雅普诺夫函数的物理意义, 有助于人们选择合适的李雅普诺夫函数. 具体到上述常用的3种李雅普诺夫函数, 所求出的控制律就是当系统性能指标分别取式(3)、式(4)或式(5)情况下, 同时满足被控系统方程约束情况下的最优控制律. 由于所选取的李雅普诺夫函数作为的性能指标的有效范围是某个初始时刻到无穷大, 而不是像标准最优控制中的性能指标的积分取之范围为某个初始时刻到给定的一个终态时刻$[t_0, t_{\mathrm{f}}]$, 因此, 采用李雅普诺夫方法不用进行黎卡提方程迭代, 而是根据确保系统稳定的条件就可以直接获得控制律的表达式. 根据控制律的表达式可以很容易地获得任意终态时刻的系统状态. 这也是基于李雅普诺夫控制进行量子状态控制设计的最大优势所在.

从另一方面来看, 基于李雅普诺夫方法的控制存在明显的缺点: 其一, 它是局部寻优控制器, 不是全局寻优控制设计. 这是由于李雅普诺夫函数的构造要求$V(x) \geqslant 0$为单调的, 并且对李雅普诺夫函数求时间导数(即梯度)的算法本身为局部寻优算法所造成的: 当期望目标态不在寻优的李雅普诺夫函数范围内, 系统将永远达不到期望目标. 由于一般量子系统都是由多个本征态构成的, 而每个本征态都是一个稳定的平衡状态. 对于这种多平衡态构成的多极值求最优控制问题, 采用基于仅适用于单极值的李雅普诺夫方法必然导致不是所有的本征目标态都能达到. 第2个缺点是, 即使是目标态落在局部寻优李雅普诺夫函数的范围内, 也不能保证所设计出的控制一定能够驱动状态从初始态收敛到目标态. 这也是由于李雅普诺夫设计方法本身造成的, 因为它是稳定控制不是收敛控制. 从系统控制理论角度上看稳定控制只能保证系统被控状态收敛到平衡态的一个小的误差范围内, 即被控态与期望态之间存在一个误差. 既然基于李雅普诺夫方法的控制只是一种稳定控制, 它从本质上决定了不能保证将系统的状态一定调整到目标态上.

4 基于李雅普诺夫方法的量子系统控制的设计(Design of quantum system control based on Lyapunov method)

尽管基于李雅普诺夫控制的设计过程比较简单, 但其本身所存在的一些不足使得人们在具体量子系统控制的应用中遇到一些困难. 对此, 人们结合量子系统本身所具有的特点, 针对不同的设计目标, 已经提出几种行之有效的改进方案来解决所遇到的问题. 下面针对不同的改进方案的设计思想, 所能解决的问题及其物理意义等进行剖析.

4.1 本征态的制备与调控(Preparation and manipulation of eigenstate)

本征态是系统的稳定态, 实际上是也经典态和量子系统在测量情况下的塌缩态. 相对来说对此状态的调控研究要简单点, 这也是人们最早开始研究基于李雅普诺夫的方法进行控制器设计的情况. 不过, 第3节中有关基于李雅普诺夫方法的缺点在对本征态的制备与调控中表现得十分突出.

1) 李雅普诺夫函数为状态距离情况.

此时采用波函数的$|\psi\rangle$的薛定谔方程为被控系统模型: $\mathrm{i}|\dot{\psi}\rangle = H|\psi\rangle$, 李雅普诺夫函数为式(3): $V_1 = (1 - |\langle \psi_{\mathrm{f}} | . \psi \rangle|^2)$, 其物理意义为: $|\langle \psi_{\mathrm{f}} | . \psi \rangle|^2$表示系统状态$|\psi\rangle$到目标态$|\psi_{\mathrm{f}}\rangle$的转移概率, 一般称之为状态距离, 因为当$|\psi\rangle$完全被驱动到$|\psi_{\mathrm{f}}\rangle$时, 即$|\psi\rangle = |\psi_{\mathrm{f}}\rangle$, 有$|\langle \psi_{\mathrm{f}} | . \psi \rangle|^2 = 1$成立, 且$V_1(|\psi_{\mathrm{f}}\rangle) = 0$, 所以满足$V_1 \geqslant 0$, 即$V_1$是个单调递减函数.

在选择状态距离为李雅普诺夫函数的情况下, 所能够解决的问题为状态转移.

利用式(3)进行量子状态转移调控的适用范围是: 仅限于初始态与目标态均为本征态的情况. 这主要是因为在对本征态的制备与调控中进行控制器设计时, 利用了系统的另外一个关系恒等式, 那就是本征方程式: $H_0 |\psi_{\mathrm{f}}\rangle = \lambda_{\mathrm{f}} |\psi_{\mathrm{f}}\rangle$. 即使这样, 所设计出的控制律也还存在如下问题: i) 不是所有的本征态之间都能进行状态转移调控, 存在不可控的本征态. 可能出现的情况是: 系统在控制律的作用下稳定到一个平衡态, 但此平衡态不是期望的目标态. ii) 当初始态与目标态相互正交时, 导致初始控制量为零而无法进行调控.

对上述两个问题常用的解决方案有两种: 通过增加一个附加控制量ωI. 这种做法相当于给被控系统状态增加了一个全局相位, 且定义当控制量的幅值为零时, 其相位为零. 在量子系统中, 全局相位不影响的系统状态的观测效果, 所以在被控系统中附加控制量ωI不会影响对原系统的控制结果. 对

第2)个问题的另一种解决方案为: 对初始控制量增加一个微量扰动量来使$u(0)\neq 0$. 当采用第1种改进方案时, 被控系统方程(2)变为

$$\mathrm{i}|\dot{\psi}\rangle=(H_0+\sum_{k=1}^{m}H_k u_k(t)+\omega I)\,|\psi\rangle\,. \tag{6a}$$

通过对所选取的李雅普诺夫函数$V_1=(1-|\langle\psi_{\rm f}|\psi\rangle|^2)$对时间求一阶导数, 可得

$$\begin{aligned}\dot{V}_1=&-2\sum_{k=1}^{m}\Im(\langle\psi_{\rm f}|\,H_k\,|\psi\rangle)u_k-\\&2\Im(\langle\psi_{\rm f}|\,(H_0+\omega I)\,|\psi\rangle)=\\&-2\sum_{k=1}^{m}\Im(\langle\psi_{\rm f}|\,H_k\,|\psi\rangle)u_k-\\&2\,(\lambda_{\rm f}+\omega)\,\Im(\langle\psi_{\rm f}\mid\psi\rangle),\end{aligned} \tag{6b}$$

其中$\Im$为算符的虚部. 通过取

$$\lambda_{\rm f}+\omega=K_0 f_0\,(\Im(\langle\psi_{\rm f}\mid\psi\rangle))\,,$$

即

$$\omega=K\cdot f(\Im(\langle\psi_{\rm f}\mid\psi\rangle))-\lambda_{\rm f},$$

可以保证$\dot{V}_1\leqslant 0$, 在此情况下, 系统的控制律为

$$u_k=K_k f_k(\Im(\langle\psi_{\rm f}|\,H_k\,|\psi\rangle)),\ k=1,\cdots,m, \tag{6c}$$

其中$K_k>0(k=0,1,2,\cdots,m)$.

只要所选取函数$f_k(x_k)=y_k$的图像单调过平面x_k-y_k的原点, 且位于第1或3象限构成控制律u_k即能够保证系统稳定, 换句话说, 控制律u_k有多种选择, 不唯一.

2) 李雅普诺夫函数为观测状态的投影(平均值)情况.

此时李雅普诺夫函数选为$V_2=\langle\psi\,|P|\,\psi\rangle$, 其中$P$为一个观测矩阵, 也称为"虚拟力学量". 一般设计时取$P=H_0=\sum_{i=1}^{N}p_i\,|\lambda_i\rangle\,\langle\lambda_i|$, p_i代表矩阵P的对角线上的元素. 已经证明[20], 对于本征态的制备与调控选取P的公式为

$$P=-\rho_{\rm f}=-\,|\psi_{\rm f}\rangle\,\langle\psi_{\rm f}|\,. \tag{7a}$$

式(7a)实际上是将期望的目标态选为V_2的最小值. 因此, 只要V_2是单调的, 不论初始状态为何值, 在收敛的、可实现的控制律的作用下, 系统将收敛到V_2的最小值: 期望的目标态.

通过分析可知V_2也是一个单调递减函数. 由于在选取$V_2=\langle\psi\,|P|\,\psi\rangle$情况下所采用的还是波函数为状态变量, 所以对系统的状态控制也仅适用于初始态与目标态均为本征态的情况. 由于在V_2中多了一个可调矩阵P, 设计者可以通过对P值的设计来使得系统在控制律的作用下, 收敛到期望的目标态, 从而避免选择V_1时可能出现的第1)个问题. 不过, 与取$V_1=(1-|\langle\psi_{\rm f}|\,\psi\rangle|^2)$时所可能遇到的相同问题是: 当初始态与目标态相互正交时, $u(0)=0$, 导致控制量为零而无法进行调控. 此时可以采用的解决方案同样是: 对初始控制量增加一个微量扰动量来使$u(0)\neq 0$.

通过对所选取的李雅普诺夫函数$V_2=\langle\psi|P|\psi\rangle$对时间求一阶导数, 可得

$$\begin{aligned}&\dot{V}_2=-\langle\dot{\psi}|P|\psi\rangle-\langle\psi|P|\dot{\psi}\rangle=\\&-\mathrm{i}\,\langle\psi|\,(H_0+\sum_{k=1}^{m}H_k u_k)P\,|\psi\rangle-\\&\mathrm{i}\,\langle\psi|P\,(H_0+\sum_{k=1}^{m}H_k u_k)\,|\psi\rangle=\\&-\mathrm{i}\,\langle\psi|\,[H_0,\,P]\,|\psi\rangle-\mathrm{i}\,\langle\psi|\,\sum_{k-1}^{m}[H_k,\,P]\,u_k|\psi\rangle=\\&-\mathrm{i}\,\langle\psi|\,[H_0,\,P]\,|\psi\rangle-\mathrm{i}\sum_{k=1}^{m}\langle\psi|\,[H_k,\,P]\,|\psi\rangle\,u_k.\end{aligned} \tag{7b}$$

通过选择P满足$[H_0,\,P]=0$, 可以获得保证$\dot{V}_2\leqslant 0$的情况下控制律的形式为

$$u_k=K_k f_k(\,\mathrm{i}\,\langle\psi|\,[H_k,\,P]\,|\psi\rangle),\ k=1,\cdots,m, \tag{7c}$$

其中参数$K_k>0(k=0,1,2,\cdots,m)$及其函数$f_k(x_k)$选择原则与V_1情况时相同.

3) 李雅普诺夫函数为状态误差情况.

此时李雅普诺夫函数的选择又可以分为两种:

① $V_3=\dfrac{1}{2}\,\langle\psi-\psi_{\rm f}\,|\psi-\psi_{\rm f}\rangle$,

② $V_4=\dfrac{1}{2}(x-x_{\rm f})'P(x-x_{\rm f})$.

两者均为一个单调减函数, 且当取$P=I$时, ②中的V_4变为①中的V_3. 由于V_3和V_4都是关于状态误差的李雅普诺夫函数, 所以从系统控制理论的角度上说, 这两种李雅普诺夫函数应当可以被应用在被控系统的状态跟踪中. 当然也能应用来进行本征态的制备和驱动, 不过此时在V_1和V_2可能出现的问题同样可能出现在V_3和V_4中.

需要强调的是: 在对V_2和V_4的设计中, 由于多了个P的设计问题, 所以是否能够驱动状态到达期望的目标态, 完全取决于P的构造(也就是V的构造). 因此系统控制的关键问题又转变成: 寻找一种构造P的方法, 使V不仅仅使系统稳定, 同时使系统收敛. 解决上述关键问题的条件为: 1) V必须是单调的; 2) 目标态对应于李雅普诺夫函数的最小值点, 即$V(\psi_{\rm f})=\min$; 3) $\dot{V}\leqslant 0$.

理论上已经证明V_1与V_3是等价的[15], 也就是说, V_3的应用价值是被限制在纯态范围的. 所以最有价值的李雅普诺夫函数应当是V_4形式.

4.2 叠加态的制备与调控(Preparation and manipulation of superposition state)

量子系统中的叠加态是由本征态的叠加生成, 纯态包含本证态和叠加态, 可以用状态变量为波函数

的薛定谔方程来描述, 所以对于叠加态制备中的李雅普诺夫函数的选择, 原则上说V_1至V_4形式均可用, 但控制器的设计过程与本征态不同. 由于调控的状态是叠加态, 使得李雅普诺夫函数对时间的一阶导数由原来调控本征态时的齐次方程变为带有漂移项的非齐次方程, 这使得控制律的求解变得困难. 具体的由对V_3的对时间的一阶导数

$$\begin{aligned}\dot{V}_3 = &-2\sum_{k=1}^{m}\Im(\langle\psi_{\rm f}|H_k|\psi\rangle)u_k - \\ &2\Im(\langle\psi_{\rm f}|(H_0)|\psi\rangle)\end{aligned} \tag{8}$$

可以看出: 当目标态$\psi_{\rm f}$不是本征态时, $\dot{V}_3$右边的第2项的符号是不确定的, 也就是说无法设计出保证$\dot{V}_3 \leqslant 0$的控制律来.

通过量子力学的基本概念以及有关量子系统控制的研究, 笔者发现在量子系统控制中可以借用量子力学中的一个很重要的数学处理方式来解决一些棘手问题, 那就是系统模型的坐标变换. 通过同样精心地选择与设计, 可以得到一个合适的李雅普诺夫函数, 并使其一阶导数较容易被判断出其正负符号来.

在叠加态的制备与调控中解决出现漂移问题的方法是: 通过将被控系统变换到一个由$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\lambda_n}|\psi\rangle$给定的旋转框架(rotating frame, RF)上, 其中$\{|\psi\rangle : n = 1,\cdots,N = \dim H\}$是由$H_0$的本征值为$\lambda_n$的本征态$|\psi\rangle$组成的$H$的一个基, 且有$H_0|\psi\rangle = \lambda_n|\psi\rangle$. 令$U(t) = \exp(-\mathrm{i}tH_0)$, 旋转框架中的动力学就是由新的(相互作用图景)哈密顿量操控: $A_k(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}H_k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t}$, 通过此变换可以将漂移项消掉.

现以V_3为例, 根据所采取的解决办法, 在设计中需要进行幺正变换$|\psi(t)\rangle = U(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle$, 其中

$$U = \mathrm{diag}\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda_1 t}, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda_2 t}, \cdots, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda_n t}\}. \tag{9}$$

由此可得变换后的系统为

$$\mathrm{i}|\dot{\tilde{\psi}}\rangle = (\tilde{H}_0 + \sum_{k=1}^{m}\tilde{H}_k u_k(t) - \varLambda)|\tilde{\psi}\rangle,$$

其中: $\varLambda = \mathrm{diag}\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}$, $\tilde{H}_0 = U^{+}H_0U$, $\tilde{H}_k = U^{+}H_kU$. 由于所采用的坐标变换实际上是不同基底的坐标旋转, 在量子系统中, 系统的描述都是在选择不同基底的表象中进行的描述, 基底选择的不同, 导致所描述的系统的形式是不同的, 但变换前后的两个系统所具有的状态的动态特性是相同的. 所以对于给定的一个系统, 在进行了坐标变换后所得到的另一个表象中的系统, 对变换后的系统从状态$|\tilde{\psi}_0\rangle$到$|\tilde{\psi}_{\rm f}\rangle$的调控, 等价于对变换前的系统从状态$|\psi_0\rangle$到$|\psi_{\rm f}\rangle$的调控. 另一方面, 通过坐标变换, V_3的对时间的一阶导数变为

$$\begin{aligned}&\dot{V}_3 = \\ &\langle\tilde{\psi}|(-\mathrm{i}\tilde{H}_0 - \mathrm{i}\sum_{k=1}^{m}\tilde{H}_k u_k(t) + \mathrm{i}\varLambda)^{+}|\tilde{\psi} - \tilde{\psi}_{\rm f}\rangle + \\ &\langle\tilde{\psi} - \tilde{\psi}_{\rm f}|(-\mathrm{i}\tilde{H}_0 - \mathrm{i}\sum_{k=1}^{m}\tilde{H}_k u_k(t) + \mathrm{i}\varLambda)|\tilde{\psi}\rangle = \\ &2\Im(\langle\tilde{\psi}|\sum_{k=1}^{m}\tilde{H}_k u_k(t)|\tilde{\psi}\rangle) - \\ &2\Im(\langle\tilde{\psi}_{\rm f}|(\tilde{H}_0 + \sum_{k=1}^{m}\tilde{H}_k u_k(t) - \varLambda)|\tilde{\psi}\rangle) = \\ &-2\Im(\langle\tilde{\psi}_{\rm f} - \tilde{\psi}|\sum_{k=1}^{m}\tilde{H}_k u_k(t)|\tilde{\psi}\rangle) - \\ &2\Im(\langle\tilde{\psi}_{\rm f}|(\tilde{H}_0 - \varLambda)|\tilde{\psi}\rangle) = \\ &-2\sum_{k=1}^{m}u_k(t)\Im(\langle\tilde{\psi}_{\rm f} - \tilde{\psi}|\tilde{H}_k|\tilde{\psi}\rangle).\end{aligned} \tag{10}$$

所以有$\dot{V}_3 \leqslant 0$成立.

相应的控制律为

$$u_k = K_k\Im(\langle\psi_{\rm f} - \psi|\tilde{H}_k|\psi\rangle). \tag{11}$$

对于包括叠加态在内的纯态调控, 不论选择V_3还是V_4, 控制律是相同的. 实际上能否调控到期望的目标态, 主要是要取决于合适的P的构造来保证系统的收敛性.

4.3 混合态的制备与调控(Preparation and manipulation of mixed-state)

如果说纯态的调控是对单位球面上点的调控, 那么, 由密度矩阵所表示的刘维尔方程的状态调控就是扩大到了包括小于单位球面的内部球上点的调控. 这将导致密度矩阵非对角线上元素出现零的情形, 即出现系统状态相干性的缺失. 在进行混合态的制备、调控与跟踪中, 由于系统状态本身的情况变得复杂化, 同样存在控制律的设计过程中, 李雅普诺夫函数对时间的一阶导数符号的正负性不易确定的问题. 所以, 借助于量子物理中常用的关键技术处理手段, 需要根据量子力学系统所具有的全局相位不具有观测效应的性质, 结合具体被控系统自身特性, 通过适当变换将系统的状态“旋转”到目标态所在的坐标系上; 将动点跟踪问题转变为不动点的调节问题, 并以此方式将李雅普诺夫函数一阶导数中的不确定值项变为具有确定正负判定值的项. 初步研究结果表明, 量子纯态与混合态的制备、调控与跟踪也存在数学关系上处理的共性. 另外, 量子态的跟踪问题也是与宏观世界系统的跟踪问题一样, 可以根据系统的调控原理通过适当数学上的技术处理, 将其变换成调节问题.

混合态的产生有两个原因: 其一是量子系统与环境相互作用, 出现耗散现象, 此时密度矩阵的演化不再是幺正的; 另一个原因是大量处于不同纯态的同种粒子的非相干混合, 即统计平均上的混合, 从这样的纯态序列系综来看一个给定的混合态, 就是将这些纯态密度矩阵按给定的概率非相干叠加, 成为一个单一的混合态矩阵. 本文仅研究不受环境影响的

封闭量子系统,因此所讨论的混合态均指系综混合态. 混合态的调控只能采用密度矩阵形式的刘维尔方程. 不过其中包含了对纯态的调控: 本征态和叠加态. 仅就单个粒子混合态的调控来看,其几何意义可以解释为在单位圆内的某个圆上的量子态的调控. 对于封闭量子系统,其纯态的调控为单位圆上的量子态的调控.

一般情况下所谓的混合态的制备与调控只能是从混合初始态到混合目标态的调控. 通俗简单的解释就是: 你只能在小于单位1的球中,在与初始混合态所在的同一个圆上进行其他混合终态的调控. 对于混合态的制备与调控,情况比较复杂: 除了在控制器设计方面就有许多需要考虑的因素以外,一般需要根据目标态本身的情况分成两种情况分别对待.

情况 1 如果目标态是本征态的统计非相干混合,即$\hat{\rho}_{\rm f}=\sum\limits_{n=1}^{N}w_n|n\rangle\langle n|$,则$\hat{\rho}_{\rm f}$是不随时间变化的固定目标态,例如

$$\hat{\rho}_{\rm f}=|0\rangle\frac{1}{4}\langle 0|+|1\rangle\frac{3}{4}\langle 1|=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&3\end{pmatrix}.$$

在这种情况下,目标态矩阵所有非对角元素都是0.

情况 2 如果目标态矩阵中的非对角元素不全为0,这也是混合态的一种情况,例如$\hat{\rho}_{\rm f}=|1\rangle\frac{1}{2}\langle 1|+(\frac{\sqrt{2}}{2}|0\rangle+\frac{\sqrt{2}}{2}|1\rangle)\frac{1}{2}(\frac{\sqrt{2}}{2}\langle 0|+\frac{\sqrt{2}}{2}\langle 1|)=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&1\\1&3\end{pmatrix}$. 在这种情况下,本征态$\hat{\rho}_{\rm f}(t)$事实上已不再是固定的,而是在$\hat{H}_0$的作用下依照刘维尔–冯诺依曼方程演化: ${\rm i}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_{\rm f}(t)=[\hat{H}_0,\hat{\rho}_{\rm f}(t)]$. 此刻目标态是一个随时间变化的函数,控制问题成为一个轨迹跟踪问题. 从系统控制的角度来看: 轨迹跟踪问题通过适当变换,可以转变其为状态驱动问题. 为了达到这个目的,可以首先对系统算符$\hat{\rho}(t)$实施一个幺正变换: $\hat{\rho}(t)=U(t)\tilde{\rho}(t)U^{\dagger}(t)$. 对期望目标态$\hat{\rho}_{\rm f}(t)$也要进行同样的幺正变换: $\hat{\rho}_{\rm f}(t)=U(t)\tilde{\rho}_{\rm f}U^{\dagger}(t)$,其中: $\tilde{\rho}_{\rm f}$是一个固定的目标态,$U(t)={\rm diag}\{{\rm e}^{-{\rm i}E_1t},{\rm e}^{-{\rm i}E_2t},\cdots,{\rm e}^{-{\rm i}E_Nt}\}$,并且$E_i(i=1,\cdots,N)$满足$\hat{H}_0={\rm diag}\{E_1,E_2,\cdots,E_N\}$. 由于所进行的变换是幺正的,因此$\hat{\rho}(t)$和$\tilde{\rho}(t)$具有相同的布居数. 以这样的方式,控制系统(1)的状态跟踪一个时变的目标态$\hat{\rho}_{\rm f}(t)$的问题等价于驱动变换后系统的状态转移到固定目标态$\tilde{\rho}_{\rm f}$的问题.

对于密度矩阵形式的李雅普诺夫函数可以选择$V_5=\frac{1}{2}(\langle\rho-\rho_{\rm f}|P|\rho-\rho_{\rm f}\rangle)$,此式相当于纯态定义中的$V_3$. 密度矩阵的另外两种形式的李雅普诺夫函数为:

$$V_6={\rm tr}\{\rho\rho_{\rm f}\}=\langle\rho_{\rm f}\rangle,$$

$$V_7=\frac{1}{2}{\rm tr}\{(\rho-\rho_{\rm f})^2\}={\rm tr}(\rho_{\rm f}^2)-{\rm tr}(\rho\rho_{\rm f}),$$

其中: V_7中的终态为纯态时,${\rm tr}(\rho_{\rm f}^2)=1$,有$V_6=V_7$.

可以证明: V_5,V_6和V_7都是等价的,所以常取

$$V={\rm tr}(P\rho). \tag{12}$$

在混合态本身的特性了解清楚并进行了相应的处理后,可以按照已经在4.1和4.2中叙述过的有关基于李雅普诺夫方法进行控制器的设计. 这里不再赘述.

如果混合态的调控情况不是出现在单位球内部的同一个半径上,在此说两个极端的情况: 一种是从任意纯态到给定的期望的目标混合态的调控,即从单位球面上的初始态转移到球内部的某个目标态; 另一种是从单位球内的某个初始混合态转移到球表面的某个目标纯态,即混合态的纯化. 这两种情况下的混合态调控问题的解决方案简述如下: 对于从任意纯态到给定的期望的目标混合态的调控,所采取的量子调控策略要复杂的多[21],最复杂的情况下需要采用3步调控来实现. 第1步为本征态的制备: 将被控系统状态由给定的任意叠加态驱动到系统的一个本征态(如果初始态是个本征态,此步省略),可采用4.1节中的方法; 第2步将获得的本征态驱动到非对角元素不为零的混合态,在这一步中需要借助一个辅助系统,该辅助系统的状态处在混合态上. 通过将辅助系统与被控系统相互作用构成一个复合系统. 通过设计一个基于李雅普诺夫的控制器,使复合系统从被控系统的本征初态驱动到辅助系统的期望混合态上. 如果期望目标态是矩阵非对角元素为零的混合态,则需要进行第3步的操控: 将第2步得到的矩阵非对角元素不为零的混合态驱动到期望的混合态. 此种情况下需要注意的是: 作为第2步的矩阵非对角元素不为零的混合态不能随便选,它必须是与目标混合态在同一个半径球面上的混合态. 对于混合态纯化问题的控制策略,只需要设计最多两步控制器[22]: 第1步只要将纯态到混合态调控中的第2步方案反过来做即可,也就是借助一个状态处在某个本征态的辅助系统,通过将辅助系统与被控系统相互作用构成一个复合系统. 设计一个基于李雅普诺夫的控制器,使复合系统从被控系统的混合初态驱动到辅助系统的本征态上. 然后,再利用4.1节中的方法,将系统状态转移到期望的纯态上.

5 总结(Conclusion)

已有的研究经验表明,采用基于李雅普诺夫的控制方法对不同量子态的制备和跟踪,从设计过程上所表现出的不同点就是在对李雅普诺夫函数对时间的一阶导数符号的判断上. 从系统控制的角度来看,基于李雅普诺夫的控制方法的最大优点就是不需要通过求解复杂的系统方程,就能够获得系统是否稳

定的判断, 而对系统状态调控的控制律就是通过利用此判断条件进行设计的, 所以设计简单. 但同时将设计难点转移到判断条件的获得上. 量子系统的操作中有关坐标旋转技术是物理和化学家们在求解物理微分时常用的一种处理手段, 把它引入到基于李雅普诺夫的控制方法中, 虽然目的不同, 但能够达到相同的效果, 这一点在已进行的研究中得到证实.

虽然基于李雅普诺夫方法所设计出的控制律中用到了系统的输出状态, 从系统控制的角度来看, 此控制律是反馈控制, 此类系统控制结构应当是一个闭环控制系统. 但是, 由于目前真正采用测量来获得的系统输出状态的闭环反馈控制在量子系统的实现中存在困难, 所以大部分实验还是开环控制. 在不少文献中常出现这样的论述: 闭环系统仿真, 开环控制实现. 实际上, 理论上所设计的反馈控制律是可以在实际中通过对理想的封闭量子系统模型进行求解来获得其输出作为控制律所需的状态变量来实现. 考虑到目前所存在着实验中的系统输出状态的获取问题, 不论是在系统仿真实验还是在实际装置的系统实验中, 都将利用系统方程的求解来获取输出状态, 将其称为“带有状态反馈的程序控制”. 此种控制可实现的前提是被控系统的方程与实际系统状态演化的一致性. 换言之, 能够被精确描述的封闭量子系统是可以满足此条件的.

本文主要就封闭量子系统中纯态和混合态的状态调控进行了研究. 有关相干态与纠缠态的制备与保持涉及到开放量子系统的控制, 以及有关李雅普诺夫控制方法的收敛性问题, 将另文作专门研究.

参考文献(References):

[1] SUGAWARA M. Local control theory for coherent manipulation of population dynamics[J]. *Journal Chemical Physics Letters*, 2002, 358(3/4): 290 – 297.

[2] SUGAWARA M. General formulation of locally designed coherent control theory for quantum system[J]. *Journal of Chemical Physics*, 2003, 118(15): 6784 – 6800.

[3] FERRANTE A, PAVON M, RACCANELLI G. Control of quantum systems using model-based feedback strategies[C] //*Proceedings of the 15th International Symposium on Mathematical Theory of Networks and Systems*. Notre Dame, IL: University of Notre Dame, 2002: 1 – 9.

[4] FERRANTE A, PAVON M, RACCANELLI G. Driving the propagator of a spin system: a feedback approach[C] //*Proceedings of the 41st IEEE Conference on Decision and Control*. Nevada: IEEE, 2002, 1: 46 – 50.

[5] PAOLO V. On the convergence of a feedback control strategy for multilevel quantum systems[C] //*Proceedings of the 15th International Symposium on Mathematical Theory of Networks and Systems*. Notre Dame, IL: University of Notre Dame, 2002, TUP4: 1 – 10.

[6] GRIVOPOULOS S, BAMIEH B. Lyapunov-based control of quantum systems[C] //*Proceedings of the 42nd IEEE Conference on Decision and Control*. Hawaii: IEEE, 2003, 1: 434 – 438.

[7] MIRRAHIMI M, ROUCHON P. Trajectory tracking for quantum systems: a Lyapunov approach[C] //*Proceedings of the International Symposium MTNS*. Belgiumu: Leven, 2004: 1 – 6.

[8] MIRRAHIMI M, ROUCHON P, TURINICI G. Lyapunov control of bilinear Schrödinger equations[J]. *Automatica*, 2005, 41(11): 1987 – 1994.

[9] MIRRAHIMI M, TURINICI G, ROUCHON P. Reference trajectory tracking for locally designed coherent quantum controls[J]. *Journal of Physical Chemistry A*, 2005, 109(11): 2631 – 2637.

[10] ALTAFINI C. Feedback control of spin systems[J]. *Quantum Information Processing*, 2007, 6(1): 9 – 36.

[11] ALTAFINI C. Feedback stabilization of isospectral control systems on complex flag manifolds: application to quantum ensembles[J]. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2007, 52(11): 2019 – 2028.

[12] WANG X, SCHIRMER S. Analysis of Lyapunov method for control of quantum states: generic case[J]. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2010, 55(10): 2259 – 2270.

[13] WANG X, SCHIRMER S. Analysis of Lyapunov method for control of quantum states: non-generic case[J]. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 55(11): 2259 – 2270.

[14] CONG Shuang, KUANG Sen. Quantum control strategy based on state distance[J]. *Acta Automatica Sinica*, 2007, 33(1): 28 – 31.

[15] KUANG Sen, CONG Shuang. Lyapunov control methods of closed quantum systems[J]. *Automatica*, 2008, 44(1): 98 – 108.

[16] ZHANG Yuanyuan, CONG Shuang. Optimal quantum control based on the Lyapunov stability theorem[J]. *Journal of University of Science and Technology of China*, 2008, 38(3): 331 – 336.

[17] CONG Shuang, ZHANG Yuanyuan. Superposition states preparation based on Lyapunov stability theorem in quantum systems[J]. *Journal of University of Science and Technology of China*, 2008, 38(7): 821 – 827.

[18] CONG Shuang, ZHANG Yuanyuan. Lyapunov-based optimal quantum pure state control strategy[C] //*International Conference on Automation, Robotics and Control Systems*. Worthington, OH: ISRST, 2009, 89 – 96.

[19] KUANG Sen, CONG Shuang, LOU Yuesheng. Population control of quantum states based on invariant subsets under diagonal Lyapunov function[C] //*Proceedings of the 48th IEEE Conference on Decision and Control*. Shanghai: IEEE, 2009: 2486 – 2491.

[20] LOU Yuesheng, CONG Shuang, YANG Jie, et al. Path programming control strategy of quantum state transfer[J]. *IET Control Theory & Applications*, 2011, 5(2): 291 – 298.

[21] WEN Jie, CONG Shuang. Transfer from arbitrary pure state to target mixed state for quantum systems[C] //*The 18th World Congress of the International Federation of Automation Control*. Italy: Milan, 2011: 4638 – 4643.

[22] YANG Fei, CONG Shuang. Purification of mixed state for two-dimensional systems via interaction control[C] //*2010 International Conference on Intelligent Systems Design and Engineering Appilications (ISDEA2010)*. Changsha: IEEE, 2010, 2: 91 – 94.

作者简介:

从　爽　(1961—), 女, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为量子系统控制、神经模糊系统、运动控制、机器人控制、运动控制等, E-mail: scong@ustc.edu.cn.