第 31 卷 第 5 期　　自 动 化 学 报　　Vol. 31, No. 5
2005 年 9 月　　ACTA AUTOMATICA SINICA　　September, 2005

开放环境下多比特量子计算机的相干控制模型1)

张 靖　李春文　吴热冰
(清华大学自动化系控制理论与控制工程研究所　北京　100084)
(E-mail: zhangjing97@mails.tsinghua.edu.cn)

摘　要　研究了开放环境下多比特量子计算系统的相干控制建模问题. 基于开放量子系统的数学模型, 选取适当的矩阵基将描述多比特量子计算机的复矩阵动态控制模型转化为实向量空间上的控制模型, 并给出计算相应的结构系数的方法. 这些工作提供了进一步研究控制律设计的基础.

关键词　开放量子系统, 量子计算机, 相干控制
中图分类号　TP13

Coherent Control Modeling of Quantum Computers in Open Environments

ZHANG Jing　LI Chun-Wen　WU Re-Bing
(*Department of Automation, Tsinghua University, Beijing*　100084)
(E-mail: zhangjing97@mails.tsinghua.edu.cn)

Abstract　The coherent control modeling problem is studied for quantum computers exposed to open environments. Originated from the mathematical model of multi-qubit open quantum systems, the matrix basis of geometric algebra is used to convert the dynamical equation of complex matrices into one of real vectors, and the corresponding structural coefficients are calculated. This work provides a basis for further research on designing control laws.

Key words　Open quantum system, quantum computer, coherent control

1　引言

量子控制是伴随着量子技术发展起来的一门新兴学科[1,2], 尤其在量子计算领域, 对于量子算法的有效实现, 需要发展系统的量子控制技术. 因为来源于物理直观的控制方法[3,4]

1) 国家自然科学基金项目 (60274025), 清华大学基础研究基金项目 (200312006)
Supported by National Natural Science Foundation of P. R. China (60274025), Fundamental research project of Tsinghua University (200312006)
收稿日期 2004-5-9　收修改稿日期 2004-8-22
Received May 9, 2004; in revised form August 22, 2004

虽然对简单的量子系统可以给出较好的结果，但是对于具有复杂网络结构的、与环境相互作用的量子系统则很难达到理想的效果. 因此有必要从一般系统的角度来研究量子控制方法.

本文将以量子计算为背景，讨论二能级系统网络在开放环境下的相干控制建模问题，目的是将量子控制模型转化为控制理论中的标准实线性空间模型. 对于一般 N 能级开放量子系统，通常的做法是将系统的密度矩阵用相干向量表示出来[5~7]. 多比特量子计算系统可以看作 N 能级量子系统的特殊情况 $N=2^n$, n 为量子比特的数目. 由于 N 随量子比特数 n 呈指数增长，所以计算系统中的结构系数的时候计算量很大，因此如何选取适当的相干向量表示以简化结构系数的计算，成为重要的问题.

本文讨论多比特量子系统基于在 NMR 技术中得到广泛应用的几何代数 (geometric algebra) 基的结构表示. 具体的，在第二节，介绍用密度矩阵表示的基于 Markov 近似的开放量子系统相干控制模型；第三节讨论多比特量子计算系统相干控制建模的一般方法；第四节，基于几何代数给出计算结构系数的算法；第五节，给出具体的物理模型建模的例子；第六节，总结并讨论需要进一步解决的问题.

2 基于密度矩阵的 Markov 相干控制模型

一般地，量子力学系统的状态用一个复希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 中的矢量 $|\psi>$ 描述. 选定 $\mathcal{H}$ 的基 $|\psi_i>, i=1,\cdots,n$ 后，$|\psi>$ 可以看作一个复数列向量. 形如 $|\psi>$ 的状态通常称为纯态. 当系统与环境发生相互作用后，由于系统状态相干性受到破坏，系统会演化成为混合态，即以 p_1 的概率处于 $|\psi_1>$ 态，$\cdots\cdots$, 以 p_n 的概率处于 $|\psi_n$ 态，其中 p_i 满足 $\sum\limits_i p_i=1, p_i\geqslant 0$. 混合态需要用密度算符 $\rho=\sum\limits_i p_i|\psi_i><\psi_i|$ 来描述，其中 $<\psi_i|$ 是 $|\psi_i>$ 的共轭转置. 易见在选定 $\mathcal{H}$ 的基后，ρ 可以表示成为一个 n 维半正定的厄米矩阵，又称为密度矩阵.

在量子计算中，用以实现量子算法的物理系统实质上是由若干二能级量子系统构成的量子网络. 具体的，一个 n 比特量子计算系统是由 n 个二能级量子系统以直积方式耦合组成的 2^n 维量子系统. 此时状态空间用如下的希尔伯特空间描述

$$\mathcal{H}=C_2\otimes\cdots\otimes C_2$$

其中每个 2 维复数空间 C_2 描述一个量子比特的状态，$\mathcal{H}$ 是一个 2^n 维的复空间.

考虑与环境的相互作用，需要用密度矩阵表示量子系统的状态. 一般来讲环境相对于系统可以看作一个很大的热库，如果仅考虑环境对于系统的作用，而忽略系统对环境状态的影响，则可以引入 Markov 近似[1] 对系统模型进行简化. 这样就得到关于 n 比特量子系统密度矩阵演化的主方程[1] (master equation):

$$\dot{\rho}=-i/h[H,\rho]+\sum_j \varGamma_j D[L_j]\rho \tag{1}$$

其中 H, L_j 是 $\mathcal{H}$ 上的算符，分别代表系统的哈密顿量和与环境发生相互作用的机制. $[A,B]=AB-BA$ 为矩阵空间上的 Lie 括号运算；$\sum\limits_j \varGamma_j D[L_j]\rho$ 项中的指标 j 标记可能影

响系统的不同渠道，$\Gamma_j \in R$ 代表相互作用强度，$D[L_j]$ 则是作用在 ρ 上的超算符：

$$D[L_i]\rho = \frac{1}{2}\{[L_j, \rho L_j^+] + [L_j\rho, L_j^+]\} \tag{2}$$

为了方便起见，下面的讨论中我们取 $\hbar = 1$. 对量子系统的控制一般是通过外加光场或电磁场与系统的某些力学量发生相互作用而加入的．在半经典近似下，这相当于把一些哈密顿量 H_i 加入系统原来的哈密顿量中以改变系统的能量．由于这种控制方式只引起系统动态的酉演化过程，仍旧保持系统的相干性不变，因此称为相干控制．所以在相干控制下系统哈密顿量 H 表示为 $H = H_0 + \sum_i u_i H_i$, 其中 H_0 表示系统自由哈密顿量，H_i 为第 i 个控制哈密顿量，$u_i(t) \in R$ 代表相应的控制强度 (如加入的激光脉冲幅度), 这个量即是我们需要设计的控制．归结起来，基于 Markov 近似的相干控制模型如下

$$\dot{\rho} = -i\hbar[H_0 + \sum_i u_i H_i, \rho] + \sum_j \Gamma_j D[L_j]\rho \tag{3}$$

3　n 比特量子系统相干控制建模

ρ 具有直观的物理含义，但由于 ρ 是 $2^n \times 2^n$ 复矩阵，非常不便于对系统进行分析，因此需要将上述模型转化为标准的实向量空间模型．一个很自然的想法就是选定一组适当的矩阵基 $\{I, \Sigma_i\}$, 其中 $\boldsymbol{\Sigma} = (\Sigma_1, \Sigma_2, \cdots, \Sigma_{4^n-1})^{\mathrm{T}}$ 为矩阵基中除去单位矩阵 I_{2^n} 剩下的矩阵所组成的矩阵向量．将 ρ 在这组基下展开为 $\rho = \frac{1}{2^n}I + \boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\Sigma}$, 其中 $\boldsymbol{m}$ 为一个 $4^n - 1$ 维向量 (单位阵的系数取 $\frac{1}{2^n}$ 是为了满足密度矩阵的几率守恒条件 $Tr\rho = 1$).

为了保证 $\vec{m}$ 为实向量，我们选取基为厄米阵，并且在矩阵内积：

$$< A, B >= Tr(A^+ B) \tag{4}$$

下是正交归一的．这样由于矩阵代数的完备性，一般可以得到如下的关系

$$\Sigma_i \Sigma_j = \sum_k (c_{ijk}\Sigma_k + i d_{ijk}\Sigma_k) + \delta_{ij} I \tag{5}$$

其中 c_{ijk} 关于三个脚标对称，即设 θ 为关于脚标 i, j, k 的置换操作，则有 $c_{ijk} = c_{\theta(ijk)}$; d_{ijk} 关于三个脚标反对称，即有 $d_{ijk} = (-1)^{\tau(\theta)} d_{\theta(ijk)}$. $\tau(\theta)$ 是置换的次数，即置换表示成对换的乘积时所含对换的个数．特别的，有 $c_{ijk} = c_{jik}$, $d_{ijk} = -d_{jik}$.

下面引入一个矩阵定义．对于给定的 $4^n - 1$ 维向量 $\boldsymbol{a}$, 令

$$(S_{\boldsymbol{a}})_{ij} = \sum_k c_{kij} a_k, (T_{\boldsymbol{a}})_{ij} = \sum_k d_{kij} a_k \tag{6}$$

由 $S_{\boldsymbol{a}}, T_{\boldsymbol{a}}$ 的定义及张量 c_{ijk} 关于脚标的对称性质和 d_{ijk} 关于脚标的反对称性直接可得矩阵 $S_{\boldsymbol{a}}, T_{\boldsymbol{a}}$ 有如下性质

1) $S_{\boldsymbol{a}}$ 为对称矩阵，$T_{\boldsymbol{a}}$ 为反对称矩阵；

2) $S_{\lambda\boldsymbol{a}+\mu\boldsymbol{b}} = \lambda S_{\boldsymbol{a}} + \mu S_{\boldsymbol{b}}$,　$T_{\lambda\boldsymbol{a}+\mu\boldsymbol{b}} = \lambda T_{\boldsymbol{a}} + \mu T_{\boldsymbol{b}}$.

引理 1. 设矩阵 $A = a_0 I + \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{\Sigma}$ 则

$$AB = (a_0 b_0 + \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b})I + (a_0\boldsymbol{b} + b_0\boldsymbol{a} + S_{\boldsymbol{a}}\boldsymbol{b} + iT_{\boldsymbol{a}}\boldsymbol{b}) \cdot \Sigma \tag{7}$$

$$[A, B] = (2iT_a \boldsymbol{b}) \cdot \Sigma \tag{8}$$

证. 由 (5) 简单计算可得. □

这样, 根据如上结果就可以将 (3) 按其在矩阵基的坐标形式下表示成向量形式:

定理 2. 按矩阵基 $\{I, \Sigma_i\}$ 将主方程模型 (3) 中各个矩阵表出

$$H = h_0 I + \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{\Sigma},\ H_i = h_i^0 I + \boldsymbol{h}_i \cdot \boldsymbol{\Sigma},\ L_j = l_j^0 + \boldsymbol{I}_j \cdot \boldsymbol{\Sigma},\ L_j^+ = (l_j^0)^* I + (\boldsymbol{I}_j)^* \cdot \boldsymbol{\Sigma}$$

设 $l_j^0 = l_j^{0^R} + i l_j^{0^l}$, $\boldsymbol{I}_j = \boldsymbol{I}_j^R + i\boldsymbol{I}_j^I$, 则主方程模型 (3) 可以表示成

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{m}} =& 2T_h \boldsymbol{m} + \sum_i u_i 2T_{h_i} \boldsymbol{m} + \sum_j \Gamma_i [2 l_j^{0l} T_{\boldsymbol{I}_j^R} - 2 l_j^{0R} T_{\boldsymbol{I}_j^I} + (T_{\boldsymbol{I}_j^R} S_{\boldsymbol{I}_j^I} + S_{\boldsymbol{I}_j^I} T_{\boldsymbol{I}_j^R}) - \\ & (T_{\boldsymbol{I}_j^I} S_{\boldsymbol{I}_j^R} + S_{\boldsymbol{I}_j^R} T_{\boldsymbol{I}_j^I})] \boldsymbol{m} + \sum_j \Gamma_j [(T_{\boldsymbol{I}_j^R} S_{\boldsymbol{I}_j^I} - S_{\boldsymbol{I}_j^I} T_{\boldsymbol{I}_j^R}) + (S_{\boldsymbol{I}_j^R} T_{\boldsymbol{I}_j^I} - T_{\boldsymbol{I}_j^I} S_{\boldsymbol{I}_j^R}) + \\ & 2T_{\boldsymbol{I}_j^R}^2 + 2T_{\boldsymbol{I}_j^I}^2] \boldsymbol{m} + \frac{1}{2^n} \sum_j \Gamma_j (T_{\boldsymbol{I}_j^R} \boldsymbol{I}_j^I - T_{\boldsymbol{I}_j^I} \boldsymbol{I}_j^R)\end{aligned} \tag{9}$$

此定理的推导主要是反复运用引理 1 的 (7),(8) 式.

我们对这个方程的结构做一下分析, 注意到方程等式右侧的 $2T_h \boldsymbol{m} + \sum\limits_i u_i 2T_{h_i} \boldsymbol{m}$ 部分代表系统在自由哈密顿量和控制作用下的动态. 由于 T_h 和 T_{h_i} 为反对称矩阵, 它们是 $4^n - 1$ 维正交旋转群 $SO(4^n - 1)$ 的李代数 $so(4^n - 1)$ 中的元素, 因此它们的作用是使系统的相干向量 $m(t)$ 在 $4^n - 1$ 维欧式空间的球面上旋转, 从而保持相干长度不变.

方程 (9) 右边剩余部分可以写成 $N\boldsymbol{m} + A\boldsymbol{m} + \boldsymbol{g}$ 的形式, 表示环境对于系统动态的影响. N 是反对称矩阵, 它对系统的影响同样不影响系统的相干性; 对称矩阵 A 对系统动态的影响引起相干向量向球面内部的收缩, 从而破坏了系统的相干性.

4 基于几何代数的相干向量表示

对于 n 比特量子计算系统可以选取一组所谓的几何代数基 $\{\sigma_{i_1} \otimes \cdots \otimes \sigma_{i_n}\} = \{I, \Sigma_i\}$[8], 其中 $\Sigma_i = I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} & 1 \\ 1 & \end{pmatrix},\ \sigma_y = \begin{pmatrix} & -i \\ i & \end{pmatrix},\ \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \tag{10}$$

为 Pauli 矩阵. 选取上述矩阵基 $\{I, \Sigma\}$ 有几个明显的优点: 首先, 形如 $\sigma_{i_1} \otimes \cdots \sigma_{i_n}$ 的矩阵可以描述不同比特之间的耦合作用, 有鲜明的物理意义; 其次, 它们常常直接作为系统的哈密顿量存在, 因此这样表示出来的矩阵非常简单, 特别是在维数很高的情况下, 由于模型中的矩阵具有很好的稀疏性而有利于数值计算; 另外, 下面可以看到, 在这组基下结构系数非常容易计算.

本节将基于这组特殊的基讨论 (5) 中的结构系数 c_{ijk} 和 d_{ijk} 的具体计算. 设 $\Sigma_i \Sigma_j = \sum\limits_k e_{ijk} \Sigma_k$, 显见对于给定脚标 i, j, 只有唯一的 k 使 e_{ijk} 不为 0, 我们只需给出计算 k 及相应的 e_{ijk} 的方法即可. 具体可分成以下三步.

第一步．对矩阵基 $\{\sigma_{i_1}\otimes\cdots\otimes\sigma_{i_n}\}$ 排序，设 $i_k=0,1,2,3$ 分别对应 $\sigma_0,\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 设 $(i_1,\cdots,i_n)$ 对应相应的矩阵基中的元素, 可以得到四进制数向量序列 $(00\cdots0)_4,\cdots,(3\cdots3)_4$. 以它们的大小顺序作为矩阵基的自然顺序；反之，对于给定脚标 i 以 4 为因子通过辗转相除可以得到相应的字典序，如脚标 $i=i_1+\cdots+i_n4^{n-1}$ 对应序列 $(i_1,\cdots,i_n)$.

第二步．对于序列中的每一位，即单比特情形，根据 $i_p,j_p,\sigma_{i_p},\sigma_{j_p}$, 计算相应的 k_p 及 $e^p_{i_pj_pk_p}$, 其中 k_p 及 $e^p_{i_pj_pk_p}$ 满足 $\sigma_{i_p}\sigma_{j_p}=e^p_{i_pj_pk_p}\sigma_{k_p}$. 经过简单计算可以将 $e^p_{i_pj_pk_p}$ 列出如表 1 所示.

表 1 单比特系统的结构系数
Table 1　Structure coefficient of one-qubit systems

(k,e_{ijk})	$j=0$	$j=1$	$j=2$	$j=3$
$i=0$	$(0,e_{000}=1)$	$(1,e_{011}=1)$	$(2,e_{022}=1)$	$(3,e_{033}=1)$
$i=1$	$(1,e_{101}=1)$	$(0,e_{110}=1)$	$(3,e_{123}=i)$	$(2,e_{132}=-i)$
$i=2$	$(2,e_{202}=1)$	$(3,e_{213}=-i)$	$(0,e_{220}=1)$	$(1,e_{231}=i)$
$i=3$	$(3,e_{303}=1)$	$(2,e_{312}=i)$	$(1,e_{321}=-i)$	$(0,e_{330}=1)$

第三步．由 $k=k_1+\cdots+k_n4^{n-1}$ 可以得到 k, 再由 $e_{ijk}=\prod\limits_p e^p_{i_pj_pk_p}$ 可以得到 e_{ijk}. e_{ijk} 可以为实数 ±1, 此时 $c_{ijk}=e_{ijk},d_{ijk}=0$; e_{ijk} 也可以为纯虚数 πi, 此时 $c_{ijk}=0,d_{ijk}=-ie_{ijk}$. 由计算出的 c_{ijk} 和 d_{ijk} 可以写出 (9) 的具体形式.

可见，在这组代数基下的表示是相当简单的．（写出 S,T 的具体表示形式)

5　例子

考察单比特量子系统的振幅退相干模型[9], 用主方程描述如下

$$\dot\rho=-i[H,\rho]+\varGamma D[\sigma_-]\rho \tag{11}$$

其中 $\sigma_-=\sigma_x-i\sigma_y$, $H=\omega\frac{1}{2}\sigma_z+u_x\frac{1}{2}\sigma_x+u_y\frac{1}{2}\sigma_y$, σ_x, σ_y, σ_z 为 (10) 中定义的 Pauli 矩阵.

这个模型用来描述二能级原子自发辐射光子的过程，它是引起退相干效应的一种主要机制．原子自身演化哈密顿量为 $H_0=\omega\frac{1}{2}\sigma_z$, 表示两个能级间的振荡过程．对原子施加 σ_x 方向和 σ_y 方向的外加磁场，加入磁场的强度 u_x 和 u_y 为我们可以自由选取的控制量． σ_- 对应的相互作用项代表由于原子与真空场发生相互作用而产生的向外自发发射光子的过程，这一过程会引起原子不可控的能级跃迁，因而对于量子计算机的物理实现影响很大.

选取矩阵基 $\Sigma=\{\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z\}$ 可以将 (11) 转化为矩阵分量 $\boldsymbol m=(x,y,z)^{\mathrm T}$ 的方程

$$\dot{\boldsymbol m}=(-\varGamma A+\omega O_z)\boldsymbol m+u_xO_x\boldsymbol m+u_yO_y\boldsymbol m+\varGamma\boldsymbol g \tag{12}$$

其中 $A=\begin{pmatrix}\frac12&&\\&\frac12&\\&&1\end{pmatrix}$, $\boldsymbol g=\begin{pmatrix}0\\0\\-1\end{pmatrix}$, $O_x=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix}$, $O_y=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\-1&0&0\end{pmatrix}$, $O_z=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$. 注意 O_x,O_y,O_z 是 3 维旋转群对应的李代数 $so(3)$ 的生成元, 可以看出系统自由哈密顿量以及相干控制在 (12) 中实际是引入了在球面方向的旋转运动. 而 $-\varGamma A\boldsymbol m+\varGamma\boldsymbol g$

会引起趋向于 z 轴方向的收缩运动，由于 x, y 对应于密度矩阵的非对角元，这一过程使得非对角元消失，即为物理中所说的退相干过程.

6 结论

本文讨论了多比特量子计算系统相干控制模型的建模问题，将原始的复数矩阵动态方程转化为实向量空间上的动态模型，并基于几何代数基给出了具体算法，得到相对简单的一种表示方法，从而为进一步对量子控制系统进行分析设计奠定了基础. 由于进一步设计控制律的时候，系统方程维数随着量子比特数的增长呈指数增长，而我们给出的方法对于常见的系统其系统矩阵具有很好的稀疏性，因此便于分析和控制律设计. 进一步还可以考虑多比特模型的降维问题.

References

1 Cheng D Z. Quantum Control — A new academic field. *Control and Decision*, 2002, **17**(5): 513～517

2 Cong S, Zheng Y S, Ji B C, Dai Y. Survey of Developments in Quantum System Control. *Chinese Journal of Quantum Electronic*, 2003, **20**(1): 1～9

3 Viola L, Lloyd S. Dynamical suppression of decoherence in two-state quantum system. *Physical Review A*, 1998, **58**(4): 2733～2744

4 Vitali D, Tombesi P. Heating and decoherence suppression using decoupling techniques. *Physical Review A*, 2001, **65**: 012305

5 Alicki R, Lendi K. Quantum Dynamical Semigroup and Applications. New York: Springer-Verlag, 1985

6 Schirmer S G, Zhang T, Leahy J V. Orbits of quantum states and geometry of Bloch vectors for N-level systems. *J. Phys. A: Math. Gen.* 2004, **37**(4): 1389～1402

7 Altafini C. Controllability properties for finite dimensional quantum Markovian master equations. *Journal of Mathematical Physics*, 2003, **44**(6): 2357

8 Matzke D J. Quantum Computation Using Geometric Algebra. [Ph. D. Thesis], Dallas J Matzke, United States: The University of Texas, 2002

9 Nielsen A. and Chuang L. Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge: Cambridge University Press, 2000. 386～389

张 靖 清华大学自动化系博士生，研究领域为量子控制，稳定性理论.

(**ZHANG Jing** Ph. D. at Tsinghua University. His research interests include quantum control and stability theory.)

李春文 清华大学自动化系教授，博士生导师，研究领域为量子控制，非线性控制及应用，非线性系统稳定性与镇定理论.

(**LI Chun-Wen** Professor. His research interests include quantum control, nonlinear control and application, and nonlinear systems stability and stabilization theory.)

吴热冰 清华大学自动化系博士生，研究领域为量子控制，逆系统方法控制.

(**WU Re-Bing** Ph. D. at Tsinghua University. His research interests include quantum control and inverse system method control.)