

求解量子控制问题的一种直接离散方法

梅自艳^{1,2},王汉权¹

(1. 云南财经大学 统计与数学学院,云南 昆明 650221;2. 云南大学滇池学院,云南 昆明 650504)

摘要:量子控制论作为一门新兴的交叉学科,有许多内容需要研究.如何把激发态解最优地操控至基态解的量子控制问题模型就是一个待解决的问题. 本篇论文针对此问题提出一种直接离散方法:先用有限差分法对量子控制问题进行直接离散,使之变为一个普通的约束优化问题,继而借助普通优化问题的求解方法得到原问题的解,最后结合 MATLAB 编程.数值试验结果验证了这一直接方法在求解量子控制问题上的高效性.

关键词:量子控制;有限差分;离散;优化

中图分类号: O244 **文献标志码:** A **文章编号:** 1672-8513(2024)01-0133-08

量子力学中的薛定谔方程描述了量子系统的运动.随着量子信息技术和量子计算的不断发展,为满足对复杂量子系统进行操纵和控制的要求,这就需要从控制论的角度对微观量子系统的行为进行建模、分析和主动控制,于是量子控制论应运而生.量子控制的研究始于 20 世纪 70 年代末,是量子力学和控制理论交叉的结果,目标是建立对量子系统进行控制的普遍理论和方法.随着量子力学的发展,量子控制模型也相应发生改变^[1].

Bennett 等先提出一种新的通信和计算量子理论,其中传输或处理的不是经典信息,而是量子态的任意叠加^[2].随后,Doherty 等指出鲁棒控制理论中的分析和综合技术的应用将发挥重要作用,且在量子计算等新兴量子技术的发展中发挥着重要作用^[3].针对量子通信和量子计算等量子信息学的发展趋势,陈宗海等对量子控制系统全面地介绍了量子控制实验研究现状并进行了相关研究展望,并阐述了一些新的研究思路^[4-5].对于在开环量子控制领域,Dong 等综述了量子系统可控性的概念,提出了几种控制设计策略,包括最优控制、基于 Lyapunov 方法、变结构控制和量子非相干控制;在闭环量子控制领域,该文回顾了闭环学习控制以及与量子反馈控制相关的几个重要问题,包括量子滤波、反馈稳定、线性二次高斯控制和鲁棒量子控制^[6].本文主要考虑量子控制问题中的一种特殊但又相对重要的情况:如何最优地把激发态解操控至基态解.针对此问题,文中提出一种直接方法:通过离散方法,把量子控制泛函极小值约束问题转化为普通的优化问题进行求解.

前期,对量子最优控制的问题已经开展了较多的研究.Rabitz 等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等进行了详细的论述^[7].近年来,D'Alessandro 等在量子最优控制方面做了大量工作,并通过李群分解的分析方法给出了一些控制场能量最优的量子控制结果^[8].Wu 等总结了时间最优时量子控制的一般特征,并给出了一些特殊情况下的最优极值的结构^[9].Petersson 等研究了在封闭量子系统中实现逻辑门的最优控制问题^[10].Boscain 等综述了各种量子控制问题,并描述了适合于最优控制的数学公式,详细介绍了不同低维量子系统的最优解,说明了数学工具是在实际中如何应用的^[11].薛拾贝等对量子系统时间最优控制问题进行了描述,并提出一类同伦算法^[12].Dong 概述了量子系统最优控制的基于梯度的学习、量子系统学习控制的进化计算、基于学习的量子鲁棒控制和量子控制的强化学习等方面^[13].近年来提出许多求解约束条件为 Gross-Pitaevskii 方程(GPE)的数值方法,如有限元法^[14]、有限差分法^[15]、无

收稿日期:2022-08-17.

基金项目:国家自然科学基金(11871418,11971120);云南省自然科学基金(202101AS070044);云南大学滇池学院基础教育学部科学研究项目(2023DYJC04).

作者简介:梅自艳(1996-),女,硕士.主要从事偏微分方程研究.

通信作者:王汉权(1974-),男,博士,教授.主要从事计算数学与科学工程计算研究.

网格法^[16]和时间分裂伪谱法^[17]等. 对于 GPE 方程的离散方法, 相关学者也介绍了一些相应的方法, 比如 Chebyshev 谱方法^[18], 有限差分法^[19]. 通过这些方法把方程进行离散, 能更好的进行数值求解. 对于求解控制问题所需的优化方法, 常见的有最速下降法、牛顿法、拟牛顿法、共轭梯度法等等^[20].

针对如何最优地把激发态解操控至基态解这一特殊量子控制问题, 本文提出一种直接离散方法: 先把连续性泛函及约束条件离散, 使原控制问题变为普通的优化问题, 然后采用普通的优化方法求解. 重点讨论如何对量子控制问题进行直接离散, 如何把量子最优控制问题转化为普通的优化问题, 探讨该数值方法的特点. 本文的结构安排如下: 第 2 节中将量子控制方程的模型及解满足的 Euler - Lagrange (EL) 方程进行介绍及求解. 第 3 节主要对连续性泛函及约束条件的直接离散方法进行详细的推导. 第 4 节将根据推导的结果进行数值试验, 并对结果进行分析, 验证这一直接方法在求解量子控制问题上的高效性. 第 5 节将对本文内容进行小结及展望.

1 一种量子控制问题模型及 EL 方程

本节主要介绍把激发态解操控至基态解的一种量子控制问题模型, 并运用相关变分法理论找出对该模型解满足的 EL 方程.

1.1 一种量子控制问题模型

近年来, 不少学者对量子控制问题进行了研究, 其中 Ulrich Hohenester 等在量子控制理论中寻找控制参数 $\lambda(t)$ 的时间变化, 讨论了如何最优地把激发态解操控至基态解这一特殊量子控制问题, 并提出如下量子控制问题的模型^[21]:

$$\begin{aligned} \min J(\psi(\vec{x}, t), \lambda(t)) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\psi(\vec{x}, T) - \psi_d(\vec{x})|^2 d\vec{x} + \frac{\gamma}{2} \int_0^T [\lambda'(t)]^2 dt, \\ \text{subject to } i\psi_t &= (H_{\lambda} + \kappa |\psi|^2) \psi, \psi(0) = \psi_0, \vec{x} \in \Omega, \psi(\vec{x}, t) = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

其中, $\vec{x} \in \mathbb{R}^d (d=1, 2, 3, \dots, n)$, $H_{\lambda} = -\frac{1}{2} \Delta + \frac{|\vec{x}|^2}{2} \lambda(t)$, 函数 $\psi_d(\vec{x})$ 表示基态解.

1.2 量子控制问题(1)满足的 EL 方程

基于前人量子控制问题满足的 EL 方程的研究^[21-23], 我们引入拉格朗日乘子 (Lagrange multipliers) 函数 $p^*(\vec{x}, t)$, 把约束优化问题转化为无约束优化问题, 得泛函

$$L(\psi, p, \lambda) = J(\psi, \lambda) + \text{Re} \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ p^*(\vec{x}, t) \int_{\Omega} [i\psi_t - (H_{\lambda} + \kappa |\psi|^2) \psi] d\vec{x} \right\} dt, \quad (2)$$

因 ψ 和 p 是复数, 所以将之改写

$$\begin{aligned} \tilde{L}[\psi, \psi^*, p, p^*, \lambda(t)] &= \tilde{J}[\psi, \psi^*, \lambda(t)] + \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ p^*(\vec{x}, t) [i\psi_t - (H_{\lambda} + \kappa \psi \psi^*) \psi] + \right. \\ &\quad \left. [-i\psi_t^* - (H_{\lambda} + \kappa \psi \psi^*) \psi^*] p(\vec{x}, t) \right\} d\vec{x} dt, \end{aligned} \quad (3)$$

这里,

$$\tilde{J}[\psi, \psi^*, \lambda(t)] = \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} \delta(t - T) (\psi(\vec{x}, t) - \psi_d(\vec{x})) (\psi^*(\vec{x}, t) - \psi_d^*(\vec{x})) d\vec{x} dt + \frac{\gamma}{2} \int_0^T [\lambda'(t)]^2 dt. \quad (4)$$

为求出泛函(3)的变分导数(或微分), 先引入一般线性空间中的泛函导数的定义^[24]:

设 X 是线性空间, Y 是赋范空间, 给定 $T: X \rightarrow Y, \forall x \in X, T(x) \in Y$, 定义在定义域 $D \subset X$, 值域 $R \subset Y$.

定义: 设 $x \in D \subset X$, 且在 X 中取一个 h , 若极限

$$\frac{\delta T}{\delta h} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} [T(x + \alpha h) - T(x)] \quad (5)$$

存在, 则其被称为 T 在 X 处增量为 h 的 Gateaux 微分. 如果 $\forall h \in X$ 极限(5)都存在, 那么变换 T 在 x 处是 Gateaux 可微的.

推论: 若泛函 $T(x) \in \mathbb{R}, x \in X, T$ 的 Gateaux 微分存在, 则

$$\frac{\delta T}{\delta h} = \left. \frac{d\phi(\alpha)}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} = \left. \frac{d}{d\alpha} T(x + \alpha h) \right|_{\alpha=0} \quad (\text{这里 } \phi(\alpha) = T(x + \alpha h) \text{ 且 } x, h \text{ 固定}). \quad (6)$$

对泛函(3), 利用变分原理^[19]及上面的泛函导数的定义(6), 有

$$\langle 1 \rangle \text{ 由 } \frac{\delta \tilde{L}}{\delta p^*} = 0, \text{ 即 } \frac{\delta \tilde{L}}{\delta p^*} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \phi_1'(\alpha)$$

其中,

$$\begin{aligned} \phi_1(\alpha) &= \tilde{L}[\psi, \psi^*, p, p^*(\vec{x}, t) + \alpha h^*(\vec{x}, t), \lambda(t)] = \tilde{J}[\psi, \psi^*, \lambda(t)] + \\ & \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} \{ (p^*(\vec{x}, t) + \alpha h^*(\vec{x}, t)) [i\psi_t - (H_{\lambda} + \kappa\psi\psi^*)\psi] + [-i\psi_t^* - (H_{\lambda} + \kappa\psi\psi^*)\psi^*] p(\vec{x}, t) \} d\vec{x} dt. \end{aligned} \quad (7)$$

故

$$\frac{\delta \tilde{L}}{\delta p^*} = \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} (i\psi_t - H_{\lambda}\psi + \kappa|\psi|^2\psi) h^*(\vec{x}, t) d\vec{x} dt = 0. \quad (8)$$

由于 $h^*(\vec{x}, t)$ 的任意性, 因此有

$$i\psi_t = H_{\lambda}\psi + \kappa|\psi|^2\psi. \quad (9)$$

$$\langle 2 \rangle \text{ 由 } \frac{\delta \tilde{L}}{\delta \psi^*} = 0, \text{ 即 } \frac{\delta \tilde{L}}{\delta \psi^*} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \varphi_2'(\alpha)$$

其中,

$$\begin{aligned} \varphi_2(\alpha) &= \tilde{L}[\psi, \psi^*(\vec{x}, t) + \alpha h^*(\vec{x}, t), p, p^*, \lambda(t)] \\ &= \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} \delta(t - T) (\psi(\vec{x}, t) - \psi_d(\vec{x})) ((\psi^*(\vec{x}, t) + \alpha h^*(\vec{x}, t)) - \psi_d^*(\vec{x})) d\vec{x} dt + \\ & \frac{\gamma}{2} \int_0^T [\lambda'(t)]^2 dt + \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} \{ p^*(\vec{x}, t) [i\psi_t - (H_{\lambda} + \kappa\psi(\psi^*(\vec{x}, t) + \alpha h^*(\vec{x}, t)))\psi] + \\ & [-i\psi_t^* - (H_{\lambda} + \kappa\psi(\psi^*(\vec{x}, t) + \alpha h^*(\vec{x}, t)))\psi^*] p(\vec{x}, t) \} d\vec{x} dt. \end{aligned} \quad (10)$$

对 $\int_0^T \int_{\Omega} -i\psi_t^* p(\vec{x}, t) d\vec{x} dt$ 使用分部积分, 得

$$\int_0^T \int_{\Omega} -i\psi_t^* p(\vec{x}, t) d\vec{x} dt = \int_0^T \int_{\Omega} [-\delta(t - T) ip(\vec{x}, t) + ip_t(\vec{x}, t)] h^*(\vec{x}, t) d\vec{x} dt.$$

故

$$\begin{aligned} \frac{\delta \tilde{L}}{\delta \psi^*} &= \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} \delta(t - T) (\psi(\vec{x}, t) - \psi_d(\vec{x})) h^*(\vec{x}, t) d\vec{x} dt + \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} [-\delta(t - T) ip(\vec{x}, t) + ip_t(\vec{x}, t) - \\ & 2\kappa|\psi|^2 p(\vec{x}, t) - H_{\lambda} p(\vec{x}, t)] h^*(\vec{x}, t) d\vec{x} dt - \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} p^*(\vec{x}, t) \kappa\psi^2 h^*(\vec{x}, t) d\vec{x} dt = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

同理,

$$ip_t(\vec{x}, t) = 2\kappa|\psi|^2 p(\vec{x}, t) + H_{\lambda} p(\vec{x}, t) + P^*(\vec{x}, t) \kappa\psi^2 + \delta(t - T) [(\psi(\vec{x}, t) - \psi_d(\vec{x})) - ip(\vec{x}, t)]. \quad (12)$$

对方程(12), 假设 p 是一个连续的函数, 考虑在很短的时间 $\Delta\tau$ 对其两边关于 T 进行积分

$$\begin{aligned} \int_{T-\Delta}^{T+\Delta} ip_t(\vec{x}, t') dt' &= \int_{T-\Delta}^{T+\Delta} \{ 2\kappa|\psi|^2 p(\vec{x}, t') + H_{\lambda} p(\vec{x}, t') + p^*(\vec{x}, t') \kappa\psi^2(\vec{x}, t') + \\ & \delta(t' - T) [(\psi(\vec{x}, t') - \psi_d(\vec{x})) - ip(\vec{x}, t')] \} dt'. \end{aligned} \quad (13)$$

取 $\Delta\tau$ 趋近于 0 的极限, 通过 p 的连续性, 方程(13)的左边会趋近于 0, 右边的前 3 项也会趋近于 0. 但是, t 中的 δ 函数在这个极限下产生了最终的时间条件:

$$ip(\vec{x}, T) = \psi(\vec{x}, T) - \psi_d(\vec{x}). \quad (14)$$

$$\langle 3 \rangle \text{ 由 } \frac{\delta \tilde{L}}{\delta \lambda} = 0, \text{ 即 } \frac{\delta \tilde{L}}{\delta \lambda} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \varphi_3'(\alpha), \text{ 其中, } H_{\lambda} = -\frac{1}{2}\Delta + \frac{|\vec{x}|^2}{2}\lambda(t), \text{ 所以}$$

$$\varphi_3(\alpha) = \tilde{L}[\psi, \psi^*, p, p^*, \lambda(t) + \alpha h(t)]$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} \delta(t-T) (\psi(\vec{x}, t) - \psi_d(\vec{x})) (\psi^*(\vec{x}, t) - \psi_d^*(\vec{x})) d\vec{x} dt + \frac{\gamma}{2} \int_0^T [(\lambda(t) + \alpha h(t))']^2 dt + \\
&\quad \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} \{ p^*(\vec{x}, t) [i\psi_t - (-\frac{1}{2}\Delta + \frac{|\vec{x}|^2}{2}(\lambda(t) + \alpha h(t)) + \kappa|\psi|^2)\psi] + \\
&\quad [-i\psi_t^* - (-\frac{1}{2}\Delta + \frac{|\vec{x}|^2}{2}(\lambda(t) + \alpha h(t)) + \kappa|\psi|^2)\psi^*] p(\vec{x}, t) \} d\vec{x} dt. \quad (15)
\end{aligned}$$

对 $\frac{\gamma}{2} \int_0^T [(\lambda(t) + \alpha h(t))']^2 dt$ 使用分部积分, 得 $\frac{\gamma}{2} \int_0^T [(\lambda(t) + \alpha h(t))']^2 dt = -\gamma \int_0^T \lambda''(t) h(t) dt$.

故

$$\begin{aligned}
\frac{\delta \tilde{L}}{\delta \lambda} &= -\gamma \int_0^T \lambda''(t) h(t) dt + \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} (-p^*(\vec{x}, t) \frac{|\vec{x}|^2}{2} \psi - \frac{|\vec{x}|^2}{2} p(\vec{x}, t) \psi^*) h(t) d\vec{x} dt \\
&= -\gamma \int_0^T \lambda''(t) h(t) dt - \int_0^T \operatorname{Re} \int_{\Omega} \frac{|\vec{x}|^2}{2} [p^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)] d\vec{x} h(t) dt = 0. \quad (16)
\end{aligned}$$

对任意的 $h(t)$, 有

$$\gamma \lambda''(t) = -\operatorname{Re} \int_{\Omega} \frac{|\vec{x}|^2}{2} [p^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)] d\vec{x}. \quad (17)$$

综上, 使 $\frac{\delta \tilde{L}}{\delta p^*} = 0, \frac{\delta \tilde{L}}{\delta \psi^*} = 0, \frac{\delta \tilde{L}}{\delta \lambda} = 0$, 得到如下原问题(1) 解所满足的 EL 方程:

$$i\psi_t = (H_{\lambda} + \kappa|\psi|^2)\psi \quad \psi(0) = \psi_0, \quad (18)$$

$$ip' = (H_{\lambda} + 2\kappa|\psi|^2)p + \kappa\psi^2 P^* \quad ip(T) = \psi(T) - \psi_d, \quad (19)$$

$$\gamma \lambda''(t) = -\operatorname{Re} \int_{\Omega} \frac{|\vec{x}|^2}{2} [p^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)] d\vec{x} \quad \lambda(0) = \lambda_0, \lambda(T) = \lambda_1. \quad (20)$$

前人在设计数值方法时, 通常基于 EL 方程(18) - (20) 来找量子控制原问题(1) 的解. 本文不采用此方法, 下一节介绍了一种直接离散方法.

2 量子控制问题的直接离散

在本节, 针对一维量子控制问题(1) (即 $d=1$) 的情况, 提出一种直接离散方法. 重点讨论如何用有限差分法对量子控制问题进行直接离散, 如何把量子最优控制问题转化为普通的优化问题, 并给出求解过程. 先将对所考虑的量子控制问题进行差分离散: 将区间 $\Omega = [a, b]$ 进行 M 等分, 取节点为 $x_j = a + jh$ ($j=0, 1, 2, \dots, M$), 空间步长 $h = \frac{b-a}{M}$; 再将 $t \in [0, T]$ 进行 N 等分, 取节点 $t_n = n\Delta t$ ($n=0, 1, 2, \dots, N$), $\Delta T = \frac{T}{N}$, 其中 M, N 都是取定的正整数. 将形成的矩形区域分割成矩形网格, 网格节点为 (x_j, t_n) .

2.1 离散方法

用 ψ_j^n, λ_n 分别表示函数 $\psi(x, t), \lambda(t)$ 在节点 (x_j, t_n) 和 t_n 处的近似值. 对于连续性泛函 $J(\psi, \lambda)$, 我们采用复化的梯形公式进行直接离散, 在每个子区间 (x_j, x_{j+1}) ($j=0, 1, 2, \dots, M-1$) 上采用梯形公式, 有

$$\begin{aligned}
J(\psi, \lambda) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\psi(x, T) - \psi_d(x)|^2 dx + \frac{\gamma}{2} \int_0^T [(\lambda'(t))]^2 dt \\
&\approx \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{M-1} \frac{h}{2} [|\psi(x_j, t_{N+1}) - \psi_d(x_j)|^2 + |\psi(x_{j+1}, t_{N+1}) - \psi_d(x_{j+1})|^2] + \frac{\gamma}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t \left(\frac{\lambda(t_{n+1}) - \lambda(t_n)}{\Delta t} \right)^2. \quad (21)
\end{aligned}$$

对于约束条件, 我们考虑 $v(x, \lambda(t)) = \frac{1}{2} x^2 \lambda(t)$, 即

$$i\psi_t = -\frac{1}{2} \partial_{xx} \psi + \frac{x^2}{2} \lambda(t) \psi + \kappa |\psi|^2 \psi. \quad (22)$$

在点 (x_j, t_n) 上进行直接离散, 时间 t 方向采用最简显格式(或向前 Euler 法), 空间 x 方向采用二阶中心差分, 即

$$i \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{h^2} \right) + \frac{x_j^2}{2} \lambda(t_n) \psi_j^n + \kappa |\psi_j^n|^2 \psi_j^n. \quad (23)$$

令 $r = \frac{\Delta t}{h^2}$, 则 $\Delta t = rh^2$, 则可将方程(23)改写成便于计算机程序的形式,使第 n 层值在右边,第 $n+1$ 层值在右边,即

$$\psi_j^{n+1} = \left(1 - ir - \frac{ix_j^2}{2} \lambda(t_n) rh^2 - \kappa i |\psi_j^n|^2 rh^2 \right) \psi_j^n + \frac{i}{2} r \psi_{j-1}^n + \frac{i}{2} r \psi_{j+1}^n \quad (0 \leq j \leq M, 0 \leq n \leq N), \quad (24)$$

$$\psi_j^0 = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{x_j^2}{4}} \quad (j=0, 1, 2, \dots, M), \quad \psi_0^{n+1} = \psi_M^{n+1} = 0 \quad (j=0, 1, 2, \dots, M). \quad (25)$$

本来期望求出 $\psi^*(x, t), \lambda^*(t) = \arg \left\{ \min_{\psi, \lambda} J(\psi, \lambda) \right\}$ 在约束条件(22)的解. 这里,我们把连续性泛函 $J(\psi, \lambda)$ 及约束条件(22)进行直接离散,使原控制问题变成了求

$$\psi^*(x_j, t_n), \lambda^*(t_n) = \arg \left\{ \min_{\psi, \lambda} J(\psi(x_j), \lambda(t_n)) \right\} \quad (0 \leq j \leq M, 0 \leq n \leq N).$$

在约束条件(24)的普通优化问题. 在求解过程中,考虑到离散公式(24) - (26),为便于计算机程序的编写,一旦向量 $\vec{\lambda} = (\lambda(t_0), \dots, \lambda(t_N))^T$ 已知, $\psi(x, T)$ 在不同节点 x_j 的值就可以近似表示出来,于是原控制问题就可以转变为 $\lambda^*(t) = \arg \left\{ \min_{\lambda} J(\vec{\lambda}) \right\}$, 最后采用普通的优化方法——内点法求解. 最终,找到最优解 ψ 在特殊节点的近似值.

2.2 求解过程

基于上节内容,得到求一维量子控制问题(1)的具体过程为:

(1) 定义泛函 $J(\vec{\lambda})$.

(2) 输入 $a = -8, b = 8, T, M, N, \kappa, \lambda$, 并且计算空间步长 $h = \frac{b-a}{M}$, 时间步长 $\Delta T = \frac{T}{N}$.

(3) 计算 $x_j = a + jh (j=0, 1, 2, \dots, M)$, 以及 $t_n = n\Delta t (n=0, 1, 2, \dots, N)$.

(4) 初始条件和边界条件的离散形式为(25).

(5) 方程(22)的离散形式为(24), 泛函 $J(\psi, \lambda)$ 的离散形式为(21).

(6) 将(24) - (26)代入(21)中得 $J(\psi, \lambda)$ 的离散形式 $J(\vec{\lambda})$.

(7) 利用 fminunc 得到函数 $\psi(x, t)$ 在节点 (x_j, t_n) 处的近似值及 $\lambda(t)$ 在点和 t_n 处的近似值, 输出结果.

3 数值结果分析

在上一节中,我们已详细介绍了一维量子控制问题的直接离散方法及求解过程. 本节将结合数值试验结果探讨该数值方法的特点. 其中 $T=0.1$, 初始的 $\psi_0(x) = 0.95 \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{x^2}{4}}$, λ_0 为 1 行 $N+1$ 列且值为 1 的向量,

期望的 $\psi_d(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{x^2}{4}}$. 针对不同的 $v(x, \lambda(t))$, 通过改变 γ 和 κ 的值来考察该数值方法的特点. 在计算

中我们取 $M = 40, N = 60$, 把期望的 ψ_d 当作准确解, 并基于上节的求解过程, 进行 MATLAB 编程, 其中计算 $\|\psi(x, T) - \psi_d(x)\|^2 = \int_{\Omega} |\psi(x, T) - \psi_d(x)|^2 dx$.

首先考虑 $\kappa = 10, x_0 = 1$ 时, 对 γ 取不同的值, 对不同的 $v(x, \lambda(t))$ 进行结果分析:

从图 1-3 可知, 无论势函数 $v(x, \lambda(t))$ 为哪一种形式, 随着 γ 的减小 T 时刻得到的 $\psi(x, T)$ 的值均与期望的 ψ_d 越来越接近, 说明此方法在求解量子控制问题上具有一定的高效性.

再考虑 $\gamma = 0.01, x_0 = 1$ 时, 考察 κ 取不同的值的影响, 并针对不同的 $v(x, \lambda(t))$ 进行结果分析:

从图 4-6 可知, 当 κ 的值越小时, $\|\psi(x, T) - \psi_d(x)\|^2$ 的值越来越小, 说明 κ 的取值越小数值逼近越好.

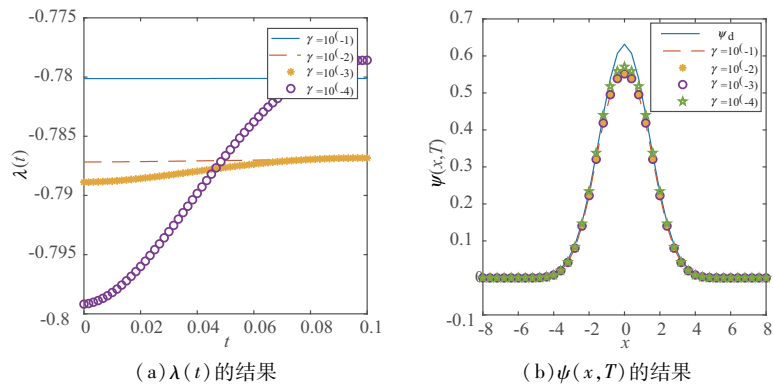


图 1 当 $v(x, \lambda(t)) = \frac{1}{2}x^2\lambda(t)$ 时,取不同 γ 时得到的数值结果

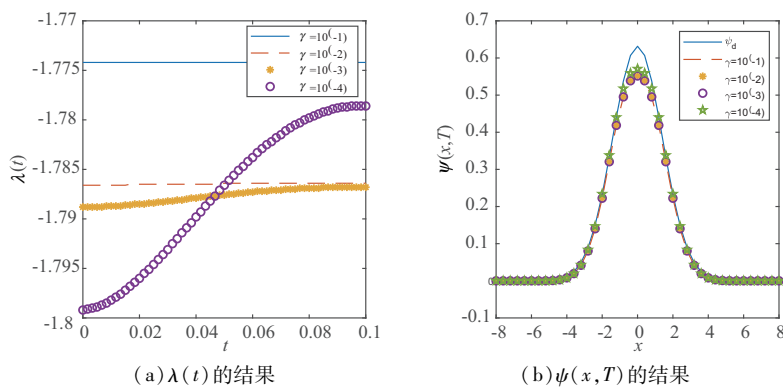


图 2 当 $v(x, \lambda(t)) = \frac{1}{2}x^2(1 + \lambda(t))$ 时,取不同 γ 时得到的数值结果

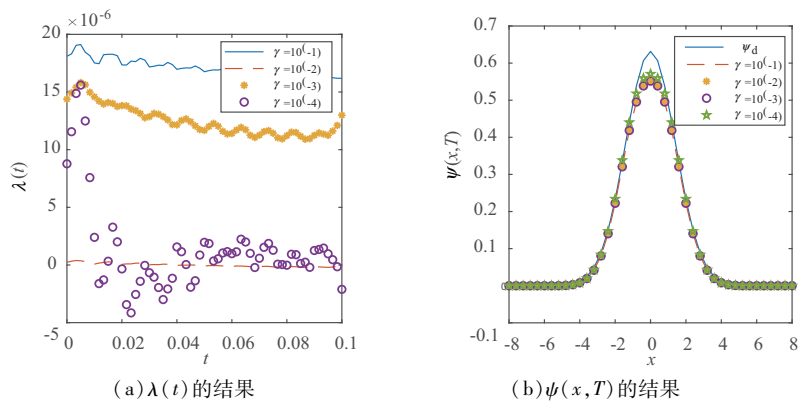


图 3 当 $v(x, \lambda(t)) = \frac{1}{2}(x - \lambda(t)x_0)^2$ 时,取不同 γ 时得到的数值结果

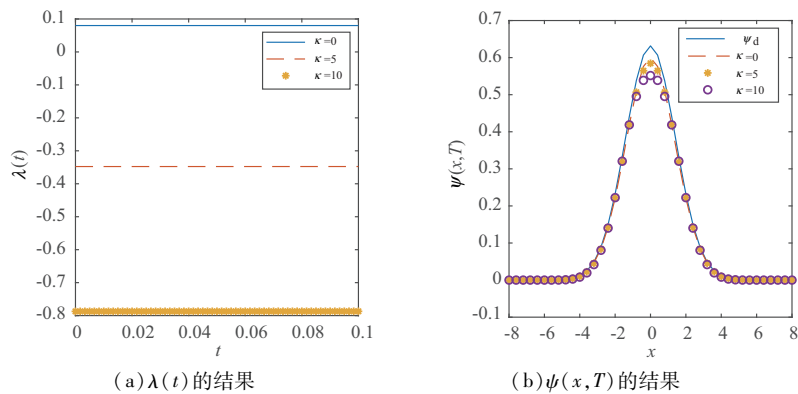


图 4 当 $v(x, \lambda(t)) = \frac{1}{2}x^2\lambda(t)$ 时,取不同 κ 时得到的数值结果

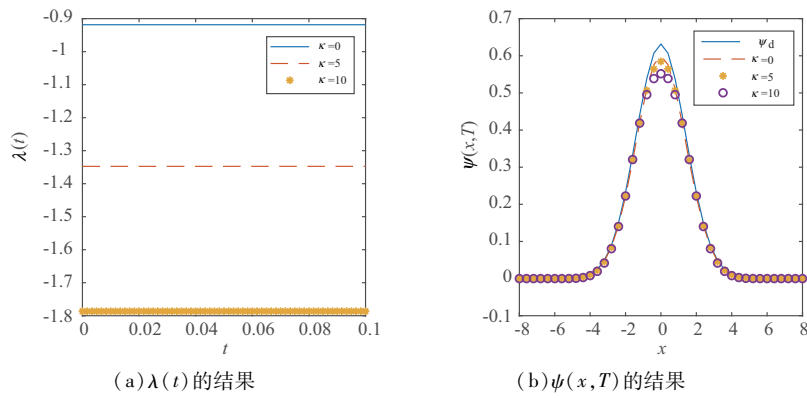


图 5 当 $v(x, \lambda(t)) = \frac{1}{2}x^2(1 + \lambda(t))$ 时,取不同 κ 时得到的数值结果

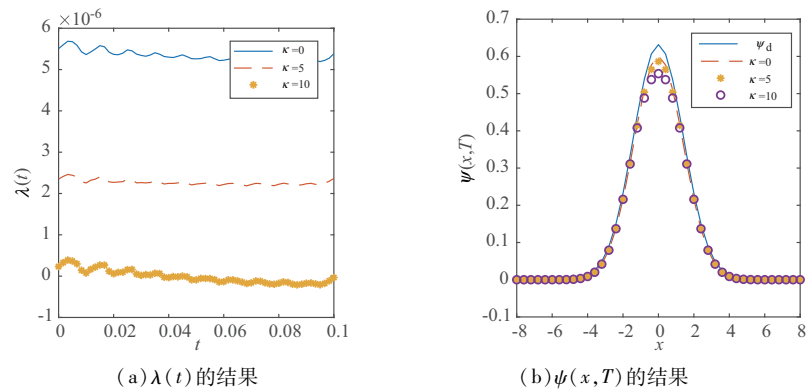


图 6 当 $v(x, \lambda(t)) = \frac{1}{2}(x - \lambda(t)x_0)^2$ 时,取不同 κ 时得到的数值结果

4 小结与展望

在本文中,理论上我们用相关变分法理论推出量子控制问题满足的 Euler - Lagrange 方程. 数值上主要考虑了一维量子控制问题中一种特殊而又相对重要的情况:如何最优地把激发态解操控至基态解. 针对此问题,提出一种直接离散方法:先把连续性泛函及约束条件离散,使量子控制泛函极小值约束问题转化为普通的优化问题,然后采用普通的优化方法求解. 重点讨论对一维量子控制问题进行直接离散,把量子最优控制问题转化为普通的优化问题,在求解过程中,大大简化了计算量. 基于 γ 和 κ 的值的变化的变化,运用 MATLAB 编写程序将其所得的数值结果与期望结果进行比较,验证了这一直接离散方法在求解此类问题模型具有一定的高效性.

针对本文所考虑的问题模型,仍有很多方面值得我们做进一步研究:还可以考虑高维问题的直接离散,泛函及约束条件的直接离散还可以考虑高阶高效的数值方法时间分裂谱方法等. 相信未来,这一直接离散方法可以在更一般的控制模型问题中得到更加广泛的应用.

参考文献:

[1] TARN T J, HUANG G, CLARK J W. Modelling of quantum mechanical control systems[J]. Mathematical Modelling, 1980, 1 (1): 109 - 121.

[2] BENNRTT C H, DIVINCENZO D P. Quantum information and computation[J]. Nature, 2000, 404(6775): 247 - 255.

[3] DOHERTY A, DOYLE J, MABUCHI H, et al. Robust control in the quantum domain[J]. Proceedings of the IEEE Conference on Decision and Control, 2001, 1: 949 - 954.

[4] 陈宗海, 董道毅. 量子控制实验研究进展[J]. 量子电子学报, 2004, 21(1): 1 - 6.

[5] 陈宗海, 董道毅. 量子系统科学的重要分支:量子控制论[J]. 世界科技研究与发展, 2005, 27(5): 7.

[6] DONG D, PETERSEN I R. Quantum control theory and applications; A survey[J]. IET Control Theory & Applications, 2009, 4(12): 2651 - 2671.

- [7] PEIRCE A P, DAHLEH M A, RABITZ H. Optimal control of quantum – mechanical systems; Existence, numerical approximation, and applications[J]. *Physical Review A*, 1988, 37(12): 4950.
- [8] D’ALESSANDRO D, DAHLEH M. Optimal control of two – level quantum systems[J]. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2001, 46(6): 866 – 876.
- [9] WU R, LI C, WANG Y. Explicitly solvable extremals of time optimal control for 2 – level quantum systems[J]. *Physics Letters A*, 2002, 295(1): 20 – 24.
- [10] PETERSSON N A, GAECIA F M, COPELAND A E, et al. Discrete Adjoints for Accurate Numerical Optimization with Application to Quantum Control[J]. 2020, 1 – 38.
- [11] BOSCAIN U, SIGALOTTI M, SUGNY D. Introduction to the Foundations of Quantum Optimal Control[J]. 2020, 1 – 37. [12] 薛拾贝, 吴热冰. 求解量子系统时间最优控制问题的同伦算法研究[J]. *控制理论与应用*, 2017, 34(11): 6.
- [13] DONG D, XING X, MA H, et al. Differential evolution for quantum robust control: Algorithm, applications and experiments [J]. *Quantum Physics*, 2020, 50(8): 3581 – 3593.
- [14] GARDNER L R T, GARDNER G A, ZAKI S I, et al. B – spline finite element studies of the non – linear Schrödinger equation [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics Engineering*, 1993, 108(3 – 4): 303 – 318.
- [15] HARFASH A J. High accuracy finite difference scheme for three – dimensional microscale heat equation[J]. *Journal of Computational & Applied Mathematics*, 2008, 220(1 – 2): 335 – 346.
- [16] ABBASBANDY S, GHEHSAREH H R, ALHUTHALI M S, et al. Comparison of meshless local weak and strong forms based on particular solutions for a nonclassical 2 – D diffusion model[J]. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 2014, 39(1): 121 – 128.
- [17] BAO W, WANG H. Ground states and dynamics of rotating Bose – Einstein condensates[J]. *Journal of Computational Physics*, 2016, 17: 612 – 626.
- [18] SHEN J, TANG T, WANG L L. Spectral methods: Algorithms, analysis and applications[M]. Springer Science & Business Media, 2011: 141 – 179.
- [19] 王汉权, 成蓉华. 微分方程数值方法——有限差分法[M]. 北京: 科学出版社, 2020.
- [20] 马昌凤. 最优化方法及其 Matlab 程序设计[M]. 北京: 科学出版社, 2010: 14 – 72.
- [21] HOHENESTER U. OCTBEC – A Matlab toolbox for optimal quantum control of Bose – Einstein condensates[J]. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(1): 194 – 216.
- [22] GEORY J, HOHENESTER U. Optimal quantum control of Bose Einstein condensates in magnetic microtraps[J]. *Physical Review A*, 2007, 88(3): 1 – 10.
- [23] BÜCKER R, BERRADA T, FRANK S V, et al. Vibrational state inversion of a Bose – Einstein condensate: optimal control and state tomography[J]. *Journal of Physics B Atomic Molecular Optical Physics*, 2012, 46(10): 104012.
- [24] DAVI G. LUENBERGER. Optimization by vector space methods[M]. John Wiley & Sons Inc, 1969: 171 – 175.

A Direct Discretization Method of Solving Quantum Control Problems

MEI Zi-yan¹, WANG Han-quan^{1,2}

(1. School of Statistics and Mathematics, Yunnan University of Finance and Economics, Kunming 650221, China;

2. School of Mathematics, Yunnan Normal University, Kunming, 650504, China)

Abstract: Quantum control, as a new interdisciplinary subject, has many points to be studied. The quantum control problem model of how to optimally manipulate the excited state solution to the ground state solution is a problem to be solved. In this paper, we propose a direct discretization method for this problem: Firstly, the quantum control problem is directly discretized by the finite difference method, which makes it be an ordinary constrained optimization problem. Then, the solution of the original problem is obtained by solving the ordinary optimization problem. Finally, combined with MATLAB programming. The numerical results show that this direct method is efficient in solving quantum control problems.

Key words: Quantum control; Finite difference; Discretization; Optimization

(责任编辑 杨柱元)