arXiv:2304.00863v1 [quant-ph] 3 Apr 2023

相干与非相干控制驱动的双量子比特系统的最优态操控

Oleg V. Morzhin[1, 2, *] 和 AlexanderN. Pechen[1, 2, †]

[1] 俄罗斯科学院斯捷克洛夫数学研究所量子技术数学方法系，俄罗斯莫斯科古布金街8号，邮编119991；[2] 俄罗斯国立科技大学（MISIS）量子工程研究与教育中心，俄罗斯莫斯科列宁斯基大街6号，邮编119991

摘要

双量子比特量子系统的最优控制备受关注，其应用范围从双量子比特门生成到优化接收器，以便沿自旋链传输相干矩阵。态制备与操控是这类系统需要研究的重要任务之一。通常使用相干控制（例如整形激光脉冲）来操控双量子比特系统。然而，环境也可以作为非相干控制资源加以利用。本文研究一个双量子比特系统的最优态操控，其动力学由 Gorini–Kossakowski–Sudarshan–Lindblad 主方程支配，其中相干控制作用于哈密顿量，非相干控制则通过兰姆位移作用于哈密顿量，并作用于耗散超算子。我们考察两类在物理上不同的相干控制相互作用，并优化末态密度矩阵与目标密度矩阵之间的希尔伯特–施密特重叠度，包括将该重叠度引导至给定值的优化。我们确定了零相干与非相干控制满足庞特里亚金极大值原理的条件，并进一步确定了它们成为目标泛函驻点的条件。此外，我们还发现一种情形：该驻点对应重叠度的全局最小值。利用重叠度的上下界，我们提出了适用于函数控制的一步和两步梯度投影法。

关键词： 量子控制、双量子比特开放量子系统、相干控制、非相干控制、庞特里亚金极大值原理、梯度投影法

1 引言

开发量子控制方法对现代量子技术至关重要 [1–10]。尤其是，量子控制用于快速生成量子门，以及构建量子计算的基本运算

*电子邮箱： morzhin.oleg@yandex.ru; mathnet.ru/eng/person30382; ORCID0000-0002-9890-1303

†电子邮箱： apechen@gmail.com; mathnet.ru/eng/person17991; ORCID0000-0001-8290-8300

。针对双量子比特和四能级开放量子系统的各种控制问题已有研究，例如 [22–31]。最优控制理论被用于推导一种优化算法，以确定给定物理模型下最佳的双量子比特纠缠门 [32]。自旋链中双量子比特量子信息的传输 N 已有研究 [33]。针对具有简并跃迁 [34, 35] 或简并能级 [36, 37]的系统，研究了某些四能级封闭量子系统的可控性。利用少量量子比特系统的优化，实现了相干矩阵在自旋链上的传输 [38]。研究人员利用系统–场耦合，阐明了光合作用模型中双量子比特系统的电子量子相干效应 [39]。多种最优控制方法被应用于量子控制问题，包括庞特里亚金极大值原理（PMP） [2, 40, 41], 、梯度流 [42]、哈密顿–雅可比–贝尔曼方程 [43], 、Krotov方法 [3, 44] （更多参考文献见综述 [45]）等。三能级系统等其他系统也备受关注 [46], 等。对于开放量子系统，人们开发了一种通用方法，通过在复斯蒂费尔流形上进行梯度优化，解决量子技术中出现的问题；同时推导出量子控制目标的梯度和海森矩阵的显式解析表达式及相应的优化技术，并研究了包括带约束情形在内的各种示例 [47, 48]。

封闭量子系统可以通过相干控制来驱动，例如使用整形激光。在开放量子系统中，相干控制可以出现在哈密顿量 [8] 中，也可以同时出现在哈密顿量和主方程的耗散部分 [49]中。除了相干控制之外，开放量子系统还可以通过各种形式的非相干控制来驱动，例如可采用 [50, 51]中提出的定制环境来实现。另一种方法是利用非选择性量子测量的反作用，单独使用或与相干控制结合使用 [52–54]。各种形式的非相干控制和工程化储库已用于光的超吸收 [55], 、非马尔可夫量子系统的控制 [56, 57] 、马尔可夫开放量子系统的控制 [58], 、腔量子电动力学中耗散的控制 [59], 、玻色–哈伯德二聚体中的非相干控制 [60], 、噪声作用下原子的光电离 [61], 、通过自主热力学机器产生量子相干性 [62], 、研究退相干 [63], 、利用量子热机控制光信号 [64], 、通过量子芝诺效应抑制退相干 [65], 、优化荧光粉中的上转换色调 [66], 、朗道–齐纳跃迁 [67], , 以及将环境辅助量子行走应用于光合能量传递 [68], 等。文献 [51]证明了由相干控制和非相干控制驱动的一般 N能级量子系统具有近似可控性。双能级情形最近得到了严格研究 [69]。例如，文献 [69–72]研究了单量子比特开放量子系统中相干控制与非相干控制的各种控制问题。针对具有时变相干控制和非相干控制的双量子比特量子系统，梯度上升脉冲工程（GRAPE）方法已得到发展 [31]。

本文研究由非相干控制驱动的双量子比特系统，其中控制通常是时间的分段连续函数。控制目标包括最大化或最小化末态密度矩阵与给定目标密度矩阵之间的希尔伯特–施密特重叠，或使重叠度尽可能接近给定的可容许值。针对最大化重叠度的问题，我们推导了目标密度矩阵需满足的条件，使得零相干与非相干控制满足庞特里亚金极大值原理，且进一步为奇异控制。针对这些问题，我们推导了目标泛函的梯度，并提出了单步梯度投影法（GPM-1）

采用文献 [73–75] 中的方法，以及采用文献 [75–78] 中的方法提出两步 GPM（GPM-2）；此外，众所周知，重球法利用最近两次迭代的结果来进行下一次更新，可显著加速单步梯度优化。

本文的结构安排如下。在第 2 节中，我们概述非相干控制方法。第 3 节介绍模型并阐述控制问题的构建。在第 4 节中，我们针对这些问题建立庞特里亚金极大值原理（定理 1），解析求解零相干与非相干控制下的系统（第 4.2 小节）；对于重叠度优化问题，我们推导出零相干与非相干控制满足庞特里亚金极大值原理的条件（定理 2），推导出这些控制构成驻点的条件（定理 3），并给出一个解析示例，说明这些奇异控制恰好是最优的（第 4.6 小节）。第 5 节介绍针对各种目标准则的 GPM-1 和 GPM-2。数值结果见第 6 节。结论部分第 7 节总结全文。

2 环境的非相干控制

如上所述，许多研究者都探讨了利用环境进行控制的各种形式。本文采用文献 [50] 提出的非相干控制方法。开放量子系统理论指出，与环境相互作用的量子系统的约化密度矩阵的主方程由以下因素决定：(1) 系统哈密顿量；(2) 系统与环境之间的相互作用哈密顿量；(3) 环境的状态。通常，系统与热浴之间的相互作用一旦系统和热浴制备完成便固定不变。然而，环境的状态可以不固定，并可用于控制。因此，即使系统与环境之间的相互作用哈密顿量固定不变，也可以通过改变环境状态来改变主方程的系数。这就是非相干控制的核心思想。

自然环境由围绕受控系统的物理粒子构成。根据具体情况，这些粒子可以是光子、声子、周围的

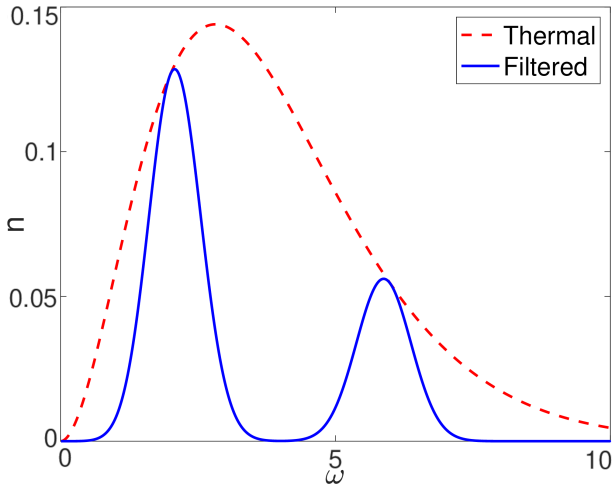

图 1：$\beta = 1$ 的黑体辐射普朗克密度及其高斯滤波结果，其中$f(\omega) = \exp\left(-\frac{(\omega-\omega_1)}{2\sigma^2}^2\right) + \exp\left(-\frac{(\omega-\omega_2)}{2\sigma^2}^2\right)$，其中 $\omega_1 = 2$、$\omega_2 = 6$，方差为 $\sigma^2 = 0.25$。

气体、自旋等。通常认为环境处于热态。逆温度为 β 时，热光子的时间无关频率分布具有著名的普朗克形式；在本文采用的普朗克单位制中（约化普朗克常数 $\hbar$、光速 c和玻尔兹曼常数 k_{B} 均取为 1），其表达式为 $n_\omega = \frac{1}{\pi^2} \frac{\omega^3}{\exp(\beta\omega) - 1}$。然而，热态这一假设限制性很强，也可以采用更一般的环境状态非平衡形式。如果温度随时间变化，使得 $\beta = \beta(t)$，那么谱密度就会随时间变化，

$$n_\omega(t) = \frac{1}{\pi^2} \frac{\omega^3}{\exp(\beta(t)\omega) - 1}.$$

改变温度只是改变 $n_\omega(t)$的最简单方法。通常，谱密度还可以通过其他方式塑造成非平衡且随时间变化的形式 $n_\omega(t)$。例如，可以通过过滤黑体辐射、使用发光二极管等方式获得此类非热形式，见图1。当然，在实验中并非总能轻易改变环境的状态。对于光子，这相对容易；对于声子，则更困难；对于量子气体，或许更加困难。任何具体情形下的实验实现都很重要，但超出了本文的讨论范围。

这种非相干控制方法可应用于各种系统-环境模型。例如，[50] 中将其应用于主方程，其中的耗散子具有在开放量子系统理论中已知的弱耦合极限和低密度极限下推导出的形式。然而，非相干控制方法并不局限于这两种主方程形式，而具有普遍性——只要利用系统周围的非相干环境状态作为控制资源，便属于这种控制。

在物理上，非相干控制可以通过使用随时间变化的非相干光子或声子的谱密度 $n_\omega(t)$ 来实现。该密度被视为跃迁频率 ω 和时间 t 的函数。当然，并非所有跃迁频率下的谱密度都能在实验中轻易地任意调节，因此实际应用取决于环境的具体类型（光子或声子）、系统的谱，以及实验上可用于产生各种 n_ω的技术。对于光子，其谱密度通常还可以包含对偏振 α的依赖，因此非相干控制可以是 ω、 α和 t的函数。这里我们不采用这种做法。

由于非相干控制在物理上表示环境的粒子数密度，因此在数学上它应为非负量。此外，还可以要求环境在任意时刻的粒子总数密度有限，从而

$$n_\omega(t) \geq 0, \qquad \int_0^\infty n_\omega(t) d\omega < \infty \qquad \forall t \geq 0.$$

非相干控制允许使主方程中的退相干率随时间变化（参见 [50]第3页），即

$$\dot{\rho}_t = -i[H_c(t), \rho_t] + \sum \gamma_{ij}(t) \mathcal{D}_{ij}(\rho_t). \tag{1}$$

能级 i 与 j 之间跃迁的时变退相干率（跃迁频率为 ω_{ij} ）通过 $n(t)$ 表示，因此

$$\gamma_{ij}(t) = \pi \int d\mathbf{k} \delta(\omega_{ij} - \omega_{\mathbf{k}}) |g(\mathbf{k})|^2 (n_{\omega_{ij}}(t) + \kappa_{ij})$$

其中 $\kappa_{ij}=1$ 对于 $i>j$ 和 $\kappa_{ij}=0$ 其他情况， $\omega_{\mathbf{k}}$ 是热浴的色散律（例如，$\omega=|\mathbf{k}|c$ 表示光子，其中 $\mathbf{k}$ 是光子动量），而 $g(\mathbf{k})$描述系统与热浴第 $\mathbf{k}$ 个模的耦合。退相干率的大小会影响系统密度矩阵非对角元的衰减速度，并决定系统密度矩阵的对角部分演化趋向的对角元取值。例如，它可用于近似生成各种密度矩阵 [51]。

3 控制系统与目标泛函

我们研究在相干控制和非相干控制作用下演化的双量子比特系统 [29,31]。我们将相干控制和非相干控制都视为分段连续函数。设$\mathcal{H}=\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$ 为双量子比特系统的希尔伯特空间。密度矩阵 $\rho(t)$ 是 4×4迹为单位的半正定矩阵， $\rho(t)\in\mathbb{C}^{4\times4}$， $\rho(t)\geq0$， $\mathbf{Tr}\rho(t)=1$。系统的动力学由以下形式的主方程（ 1 ）描述

$$\dot{\rho}(t)=-i\left[H_S+\varepsilon H_{\mathrm{eff},n(t)}+H_{u(t)},\rho(t)\right]+\varepsilon\mathcal{L}_{n(t)}(\rho(t)),\qquad\rho(t)=\rho_0. \tag{2}$$

其中， H_S 是双量子比特自由哈密顿量， $H_{\mathrm{eff},\ n(t)}$ 是双量子比特有效哈密顿量（兰姆位移），由非相干控制 $n=(n_{\omega_1},\ n_{\omega_2})$ 确定； $H_{u(t)}=Vu(t)$ 表示通过相互作用算符 V 与相干控制 u 耦合；$\mathbf{L}^{n(t)}(\rho(t))$ 是依赖于 n的耗散超算子， $\varepsilon>0$ 描述系统与环境之间耦合的强度， ρ_0 是初始态，可以是纯态或混合态。我们将完整控制记为 $c=(u,\ n_1,\ n_2)$。记号 $[A,B]=AB-BA$ 表示矩阵 A 和 B的对易子。

自由哈密顿量和有效哈密顿量为：

$$H_S=H_{S,1}+H_{S,2}=\frac{\omega_1}{2}\left(\sigma^z\otimes\mathbb{I}_2\right)+\frac{\omega_2}{2}\left(\mathbb{I}_2\otimes\sigma^z\right), \tag{3}$$

$$H_{\mathrm{eff},n(t)}=\sum_{i=1}^{2}H_{\mathrm{eff},n(t),i}=\Lambda_1 n_{\omega_1}(t)\left(\sigma^z\otimes\mathbb{I}_2\right)+\Lambda_2 n_{\omega_2}(t)\left(\mathbb{I}_2\otimes\sigma^z\right) \tag{4}$$

其中， $\sigma^z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$ 是 Z 泡利矩阵， $\mathbb{I}_2$ 是 2×2 单位矩阵， $\sigma^z\otimes\mathbb{I}_2=\begin{pmatrix}\mathbb{I}_2&0_2\\0_2&-\mathbb{I}_2\end{pmatrix}$、$\mathbb{I}_2\otimes\sigma^z=\begin{pmatrix}\sigma^z&0_2\\0_2&\sigma^z\end{pmatrix}$、$0_2$ 是 2×2 零矩阵。非相干控制$n_1=n_{\omega_1}$ 和 $n_2=n_{\omega_2}$表示环境在频率 ω_1 和 ω_2 处的粒子数密度，且可以独立调节。我们记作 $n=(n_1,\ n_2)$。根据其物理意义，有

$$n_1(t)\geq0,\qquad n_2(t)\geq0\qquad\text{for all}\quad t\in[0,T]. \tag{5}$$

相互作用算符 $H_{u(t)}=Vu(t)$ 通常取任意厄米矩阵 V；具体而言，如[29], 所示，我们考虑以下两个版本：

$$V=V_1=\sigma^x\otimes\mathbb{I}_2+\mathbb{I}_2\otimes\sigma^x=\begin{pmatrix}\sigma^x&\mathbb{I}_2\\\mathbb{I}_2&\sigma^x\end{pmatrix},\qquad V=V_2=\sigma^x\otimes\sigma^x=\begin{pmatrix}0_2&\sigma^x\\\sigma^x&0_2\end{pmatrix}, \tag{6}$$

其中，$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ 是泡利矩阵。在 $V = V_1$的情况下，同一相干控制 u分别独立作用于每个量子比特；而在 $V = V_2$的情况下，控制 u 通过XX耦合使量子比特相互耦合。

耗散超算子作用于密度矩阵上可表示为

$$\mathcal{L}_{n(t)}(\rho(t)) = \mathcal{L}_{n(t),1}(\rho(t)) + \mathcal{L}_{n(t),2}(\rho(t)), \tag{7}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{n(t),j}(\rho(t)) = {} & \Omega_j(n_{\omega_j}(t)+1)\left(2\sigma_j^-\rho\sigma_j^+ - \sigma_j^+\sigma_j^-\rho - \rho\sigma_j^+\sigma_j^-\right) \\ & + \Omega_j n_{\omega_j}(t)\left(2\sigma_j^+\rho\sigma_j^- - \sigma_j^-\sigma_j^+\rho - \rho\sigma_j^-\sigma_j^+\right), \quad j = 1, 2,\end{aligned} \tag{8}$$

其中，$\Lambda_j > 0$ 和 $\Omega_j > 0$ 是一些常数，且$\sigma_1^\pm = \sigma^\pm \otimes \mathbb{I}_2$、$\sigma_2^\pm = \mathbb{I}_2 \otimes \sigma^\pm$ 满足 $\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$、$\sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$。记号 $\{A, B\} = AB + BA$ 表示矩阵 A 和 B的反对易子。

我们研究的目标函数是 $\rho(T)$与给定目标密度矩阵 ρ_{target}之间的希尔伯特–施密特重叠度，其中 $\rho(T)$在某个容许控制 c作用下演化：$F(\rho(T)\ \rho_{\text{target}}) := \mathrm{h}\rho(T)\ \rho_{\text{target}}\mathrm{i} = \mathrm{Tr}(\rho(T)\ \rho_{\text{target}})$。我们考虑最大化和最小化重叠度，以及将重叠引导至给定值 $M \in (0, 1)$的问题：

$$J(c) = F(\rho(T); \rho_{\text{target}}) = \langle \rho(T), \rho_{\text{target}} \rangle \to \sup / \inf, \tag{9}$$

$$J_{M,1}(c) = |F(\rho(T); \rho_{\text{target}}) - M| = |\langle \rho(T), \rho_{\text{target}} \rangle - M| \to \inf, \tag{10}$$

$$J_{M,2}(c) = (F(\rho(T); \rho_{\text{target}}) - M)^2 = (\langle \rho(T), \rho_{\text{target}} \rangle - M)^2 \to \inf. \tag{11}$$

我们采用文献[29]中所进行的密度矩阵实化。于是，具有相互作用 $V = V_1$ 或 $V = V_2$ 的系统（2）以及（3、4）、（7、8）可化为关于表示密度矩阵各元素实部和虚部的实向量的线性常微分方程系统。密度矩阵的厄米性给出

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{1,1} & \rho_{1,2} & \rho_{1,3} & \rho_{1,4} \\ \rho_{1,2}^* & \rho_{2,2} & \rho_{2,3} & \rho_{2,4} \\ \rho_{1,3}^* & \rho_{2,3}^* & \rho_{3,3} & \rho_{3,4} \\ \rho_{1,4}^* & \rho_{2,4}^* & \rho_{3,4}^* & \rho_{4,4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 + ix_3 & x_4 + ix_5 & x_6 + ix_7 \\ x_2 - ix_3 & x_8 & x_9 + ix_{10} & x_{11} + ix_{12} \\ x_4 - ix_5 & x_9 - ix_{10} & x_{13} & x_{14} + ix_{15} \\ x_6 - ix_7 & x_{11} - ix_{12} & x_{14} - ix_{15} & x_{16} \end{pmatrix}. \tag{12}$$

这里 $x_j \in \mathbb{R}$, $j = \overline{1, 16}$。条件 $\mathrm{Tr}\rho = 1$ 意味着线性相关

$$x_1 + x_8 + x_{13} + x_{16} = 1. \tag{13}$$

对于 V的两种变体，如 [29] 所示，我们得到具有给定初始态的相应两个双线性齐次动力学系统：

$$\dot{x}(t) = (A + B_u u(t) + B_{n_1} n_1(t) + B_{n_2} n_2(t))\, x(t), \qquad x(0) = x_0. \tag{14}$$

这里 16×16矩阵 A，B_u，B_{n_1}，B_{n_2}是在将（12）代入（2）后得到的；x_0由给定的 ρ_0得出。

厄米矩阵[79] 半正定的判据（定理 7.2）表明，ρ半正定，当且仅当 ρ 的每个主子矩阵的行列式均非负。根据构造，主方程和系统（14）的解满足这些条件。

用（9–11）表示的（12）中的问题为：

$$J(c) = \mathcal{F}(x(T); x_{\text{target}}) = \langle x(T), \beta \circ x_{\text{target}} \rangle \to \sup / \inf, \tag{15}$$

$$J_{M,1}(c) = |\mathcal{F}(x(T); x_{\text{target}}) - M| = |\langle x(T), \beta \circ x_{\text{target}} \rangle - M| \to \inf, \tag{16}$$

$$J_{M,2}(c) = (\mathcal{F}(x(T); x_{\text{target}}) - M)^2 = (\langle x(T), \beta \circ x_{\text{target}} \rangle - M)^2 \to \inf, \tag{17}$$

其中 $\beta = (1, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 1, 2, 2, 2, 2, 1, 2, 2, 1)$，“$\circ$”表示 Hadamard 乘积。

终端函数$J_{M,\,1}$不可连续微分，但它准确描述了重叠度与 M之间的差异。次微分 $\partial(|y - M|)$ 为 -1 当$y < M$时为 1；当 $y > M$时为 $[-1, 1]$当 $y = M$时。另一方面，对于非光滑目标泛函$J_{M,\,1}(c)$，一种可行方法是利用相应工具（次梯度等）发展非光滑优化[80]。另一方面，我们可以通过引入以下辅助目标泛函，对（16）进行平滑化，并采用某些 $0 < \theta \ll 1$，这与 [81, 第 8]节类似：

$$J^{\theta}_{M,1}(c) = \begin{cases} -\mathcal{F}(x(T); x_{\text{target}}) + M, \\ \qquad\qquad \text{if} \quad \mathcal{F}(x(T); x_{\text{target}}) < M - \theta; \\ \mathcal{F}(x(T); x_{\text{target}}) - M, \\ \qquad\qquad \text{if} \quad \mathcal{F}(x(T); x_{\text{target}}) > M + \theta; \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{(\mathcal{F}(x(T); x_{\text{target}}) - M)^2}{\theta} + \theta\right), \\ \qquad\qquad \text{if} \quad |\mathcal{F}(x(T); x_{\text{target}}) - M| \le \theta \end{cases} \to \inf . \tag{18}$$

这个分段定义的终端函数已经是连续可微的。

对于系统（14）以及控制问题（15）、（17）和（18），考虑将目标泛函 $I(c)$ 最小化，它可以是$\overline{J} - J(c)$（其中 $\overline{J}$ 是重叠度的某个上界），也可以是 $J(c)$，或 $J_{M,\,2}(c)$，或 $J^{\theta}_{M,\,1}(c)$。

在优化后分析中，除了优化控制 u，n_1，n_2 及相应的解 ρ之外，还可以研究 $F(\rho(t); \rho_{\text{target}})$ 随时间的演化。类似地，在 (18) 中用 $x(t)$ 替代 $x(T)$，即可定义关于 t 的函数 $F^{\theta}_{M,1}(\rho(t); \rho_{\text{target}})$。对于 $\rho(t)$，考虑冯·诺依曼熵 $S(\rho)$、纯度 $P(\rho)$、Uhlmann–Jozsa 保真度 $UJ(\rho_1; \rho_2)$[71, 82], 量子相对熵 $D(\rho_1; \rho_2)$（Kullback–Leibler 散度的量子对应物）[83,84], Petz–Rényi 相对熵 $D_\alpha(\rho_1; \rho_2)$ [84], ，其中我们用 $\rho(t)$ 代替 ρ 和 ρ_1，并用 ρ_{target} 代替 ρ_2:

$$S(\rho(t)) = -\text{Tr}\,(\rho(t)\log\rho(t)) = -\sum_{\lambda_i(t)\neq 0} \lambda_i(t)\log\lambda_i(t) \in [0, \log\dim\mathcal{H}], \tag{19}$$

$$P(\rho(t)) = \text{Tr}\rho^2(t) = \langle\rho(t), \rho(t)\rangle = \sum_{i,j}|\rho_{ij}(t)|^2 \in [1/\dim\mathcal{H}, 1]\,, \tag{20}$$

$$UJ(\rho(t); \rho_{\text{target}}) = \left(\text{Tr}\sqrt{\sqrt{\rho(t)}\rho_{\text{target}}\sqrt{\rho(t)}}\right)^2 \in [0, 1], \tag{21}$$

$$D(\rho(t); \rho_{\text{target}}) = \text{Tr}\,(\rho(t)(\log\rho(t) - \log\rho_{\text{target}})) \ge 0, \tag{22}$$

$$D_\alpha(\rho(t); \rho_{\text{target}}) = \frac{1}{\alpha - 1}\log\text{Tr}\left(\rho^\alpha(t)\rho^{1-\alpha}_{\text{target}}\right) \ge 0,\ \alpha \in (0, 1)\cup(1, \infty), \tag{23}$$

其中 $\lambda_i(t)$ 是 $\rho(t)$ 的特征值。在我们的情形中，希尔伯特空间的维数为 $\mathrm{dimH} = 4$。冯·诺依曼熵在纯态时取最小值，等于零；在完全混合量子态 $\rho = \mathbb{I}/\mathrm{dimH}$ 时达到最大值；在我们的情形中，$\log \mathrm{dimH} = \log 4 \approx 1.386$。纯度在任意纯态时取最大值 1，在完全混合态时取最小值 $1/\mathrm{dimH}$。于是有 $UJ(\rho_{\mathrm{target}};\ \rho_{\mathrm{target}}) = 1$, $D(\rho_{\mathrm{target}};\ \rho_{\mathrm{target}}) = 0$, $D_\alpha(\rho_{\mathrm{target}};\ \rho_{\mathrm{target}}) = 0$, and $D(\rho(t);\ \rho_{\mathrm{target}}) = \lim_{\alpha\to 1} D_\alpha(\rho(t);\ \rho_{\mathrm{target}})$。

4 庞特里亚金极大值原理与零控制

4.1 庞特里亚金极大值原理

我们问题的庞特里亚金函数为 [85] $(p, x, u, n_1, n_2) = \mathbf{h}p,\ (A + B_u u + B_{n_1} n_1 + B_{n_2} n_2)\ x\mathbf{i} = \mathbf{K}^u u + \mathbf{K}^{n_1} n_1 + \mathbf{K}^{n_2} n_2 + \overline{h}\ (p, x)$，其中 $p, x \in \mathbb{R}^{16}$ 和 $u, n_1, n_2 \in \mathbb{R}$（即这里的 p, x, u, n_1, n_2 是实数值而非函数），切换函数为 $\mathbf{K}^u = \frac{\partial h}{\partial u} = \mathbf{h}p, B_u x\mathbf{i}$、$\mathbf{K}^{n_j} = \frac{\partial h}{\partial n_j} = \mathbf{h}p, B_{n_j} x\mathbf{i}$、$j = 1$、2；$\overline{h} = \mathbf{h}p, Ax\mathbf{i}$。共轭系统为

$$\dot{p}(t) = -\left(A^T + B_u^T u(t) + B_{n_1}^T n_1(t) + B_{n_2}^T n_2(t)\right) p(t), \tag{24}$$

其中，针对 $J(c)$ 的极大化问题（$s = 1$）和极小化问题（$s = -1$），横截条件为：

$$p(T) = s\nabla\mathcal{F}(x; x_{\mathrm{target}})\Big|_{x=x(T)} = s\beta \circ x_{\mathrm{target}}. \tag{25}$$

这里，函数 x 是方程 (14) 在相同控制 c下的解，该控制也用于 (24)。对于最小化 $J_{M,2}(c)$ 的问题：

$$p(T) = -2\left(\mathcal{F}(x(T); x_{\mathrm{target}}) - M\right)\beta \circ x_{\mathrm{target}}. \tag{26}$$

对于最小化 $J^\theta_{M,1}(c)$ 的问题：

$$p(T) = \begin{cases} \beta \circ x_{\mathrm{target}}, & \mathcal{F}(x(T); x_{\mathrm{target}}) < M - \theta; \\ -\beta \circ x_{\mathrm{target}}, & \mathcal{F}(x(T); x_{\mathrm{target}}) > M + \theta; \\ \frac{\mathcal{F}(x(T); x_{\mathrm{target}}) - M}{\theta}\beta \circ x_{\mathrm{target}}, & \mathcal{F}(x(T); x_{\mathrm{target}}) \in [M - \theta, M + \theta]. \end{cases} \tag{27}$$

如果仅采用约束 (5)，那么 $c(t) \in Q_\infty := \mathbb{R} \times [0, \infty)^2$。根据庞特里亚金极大值原理理论，对于每个 t，庞特里亚金函数应在变量 u, n_1, n_2 上取最大值。因此，除约束 (5) 外，我们还考虑约束 $u_{\min} \le u(t) \le u_{\max}$, $n_j(t) \le n_{\max}$, $\forall t \in [0, T]$，其中某个 $u_{\min} < 0 < u_{\max}$，以及 $n_{\max} \in (0, \infty)$。于是，对于任意 $t \in [0, T]$，$c(t) \in Q_{\mathrm{compact}} := [n_{\min}, n_{\max}] \times [0, n_{\max}]^2$。相应地，我们考虑分段连续控制的函数类 $PC([0, T];\ Q_\infty)$ 和 $PC([0, T];\ Q_{\mathrm{compact}})$。

定理 1（庞特里亚金极大值原理——最优性一阶必要条件）。考虑系统（*14*）及其控制 $c = (u, n_1, n_2) \in PC([0, T];\ Q_{\mathrm{compact}})$，以及在固定终止时间 T 下，极大化或极小化 $J(c)$ 并最小化 $J_{M,2}(c)$ 或 $J^\theta_{M,1}$的问题，

初始态 x_0 和目标态 x_{target}。若 $c^* = (u^*, n_1^*, n_2^*)$ 是其中某个问题的最优控制，则存在连续向量函数 p^*，它满足带有相应于（25）至（27）的横截条件的共轭系统（24），其中$u = u^*$, $n_1 = n_1^*$, $n_2 = n_2^*$, $x = x^*$，且对任意 $t \in [0, T]$，均满足以下极大化条件：

$$\max_{u\in[u_{\min},u_{\max}]} \mathcal{K}^u(p^*(t), x^*(t))u = \mathcal{K}^u(p^*(t), x^*(t))u^*(t), \tag{28}$$

$$\max_{n_j\in[0,n_{\max}]} \mathcal{K}^{n_j}(p^*(t), x^*(t))n_j = \mathcal{K}^{n_j}(p^*(t), x^*(t))n_j^*(t), \quad j = 1, 2. \tag{29}$$

这里 x^* 是带控制 $c = c^*$的系统（14）的解。

4.2 零控制下量子系统的演化

如果在（2）中相干控制 $u = 0$，那么算符 $H_{u(t)} = Vu$（t）以及系统（2）、（14）均不依赖于 V的形式。对于控制 $c = \overline{c}$，当 $\overline{u} = \overline{n}_1 = \overline{n}_2 = 0$时，（14）变为 $\dot{\overline{x}} = A\overline{x}$，$\overline{x}$（0）$= x_0$ 其解为 $\overline{x} = e^{At}x_0$。

考虑以下参数化初始态和目标态：

$$\rho_0 = \text{diag}(a_1, a_2, a_3, a_4), \qquad \rho_{\text{target}} = \text{diag}(b_1, b_2, b_3, b_4) \tag{30}$$

$$\text{s.t.} \qquad a_j, b_j \geq 0, \qquad j = 1, 2, 3, 4, \qquad \sum_{j=1}^{4} a_j = 1, \qquad \sum_{j=1}^{4} b_j = 1. \tag{31}$$

这些不等式保证矩阵的半正定性和单位迹。对于（30），有

$$x_0 = (a_1,\ \text{six zeros},\ a_2,\ \text{four zeros},\ a_3,\ 0,\ 0,\ a_4), \tag{32}$$

$$x_{\text{target}} = (b_1,\ \text{six zeros},\ b_2,\ \text{four zeros},\ b_3,\ 0,\ 0,\ b_4). \tag{33}$$

带有（14）和（32）的系统解 $c = \overline{c}$ 为

$$\begin{aligned}
&\overline{x}_1 = a_1 + a_2 - a_2e^{-2\varepsilon\Omega_2 t} + e^{-2\varepsilon(\Omega_1+\Omega_2)t}(e^{2\varepsilon\Omega_1 t} - 1)(a_3e^{2\varepsilon\Omega_2 t} + a_4(e^{2\varepsilon\Omega_2 t} - 1)),\\
&\overline{x}_8 = e^{-2\varepsilon\Omega_2 t}(a_2 + a_4 - a_4e^{-2\varepsilon\Omega_1 t}), \quad \overline{x}_{13} = e^{-2\varepsilon\Omega_1 t}(a_3 + a_4 - a_4e^{-2\varepsilon\Omega_2 t}),\\
&\overline{x}_{16} = a_4e^{-2\varepsilon(\Omega_1+\Omega_2)t}, \quad \overline{x}_j = 0, \quad j \in \overline{1, 16} \setminus \{1, 8, 13, 16\}.
\end{aligned} \tag{34}$$

考虑初始态 $x_0 =$（1，十五个零），其对应的纯态为 $\rho_0 = \text{diag}(1,\ 0,\ 0,\ 0)$。则系统（14）的解为 $\overline{x}_1$（t）$\equiv 1$ 以及 $\overline{x}_i$（t）$\equiv 0$，$i = 2,\ 16$。向量 $A\overline{x}$ 变为零，系统（14）在此 x_0 中可保持任意长的时间。点 $\overline{x} =$（1，十五个零）对于（14）是奇异的。

如果 $\rho_0 \neq \text{diag}(1,\ 0,\ 0,\ 0)$，则对于系统（14）有

$$\lim_{t\to\infty} \overline{\rho}(t) = \text{diag}\left(\lim_{t\to\infty} \overline{x}_i(t)\right)_{i=1,8,13,16} = \text{diag}\left(\sum_{j=1}^{4} a_j, 0, 0, 0\right) = \text{diag}(1, 0, 0, 0). \tag{35}$$

终端函数 F(x; x_{target}) 在 $x = \overline{x}(t)$ 下，$t \to \infty$ 满足：

$$\lim_{t\to\infty} \langle \overline{x}(t), \beta \circ x_{\text{target}} \rangle = \lim_{t\to\infty} \sum_{i=1,8,13,16} b_i\overline{x}_i(t) = (a_1 + a_2 + a_3 + a_4)b_1. \tag{36}$$

4.3 庞特里亚金极大值原理。当零相干与非相干控制满足庞特里亚金极大值原理

对于具有初始态 (14) 的系统 (32)，考虑最大化和最小化 $J(c)$ 的问题，其中 x_{target} 具有形式 (33)。考虑共轭系统 (24, 25)。对于控制 $c=\overline{c}$，该系统变为 $\dot{\overline{p}}=-A^T\overline{p}$, $\overline{p}(T)=s\beta\circ x_{\text{target}}=sx_{\text{target}\circ}$ 其解为：

$$
\begin{aligned}
&\overline{p}_1=b_1 s, \qquad \overline{p}_8=e^{-2\varepsilon\Omega_2 T}\left(b_2 e^{2\varepsilon\Omega_2 t}+b_1\left(-e^{2\varepsilon\Omega_2 t}+e^{2\varepsilon\Omega_2 T}\right)\right)s,\\
&\overline{p}_{13}=e^{-2\varepsilon\Omega_1 T}\left(b_3 e^{2\varepsilon\Omega_1 t}+b_1\left(-e^{2\varepsilon\Omega_1 t}+e^{2\varepsilon\Omega_1 T}\right)\right)s,\\
&\overline{p}_{16}=e^{-4\varepsilon(\Omega_1+\Omega_2)T}\Big(b_2\left(-e^{2\varepsilon(\Omega_1+\Omega_2)(t+T)}+e^{2\varepsilon(2\Omega_1 T+\Omega_2 t+\Omega_2 T)}\right)+e^{2\varepsilon(\Omega_1+\Omega_2)T}\Big(-b_3 e^{2\varepsilon(\Omega_1+\Omega_2)t}\\
&\qquad +b_4 e^{2\varepsilon(\Omega_1+\Omega_2)t}+b_3 e^{2\varepsilon(\Omega_1 t+\Omega_2 T)}+b_1\left(e^{2\varepsilon\Omega_1 t}-e^{2\varepsilon\Omega_1 T}\right)\left(e^{2\varepsilon\Omega_2 t}-e^{2\varepsilon\Omega_2 T}\right)\Big)\Big)s,\\
&\overline{p}_j=0, \quad j\in\overline{1,16}\setminus\{1,8,13,16\}.
\end{aligned}
$$

T该系统不依赖于 a_j, $j=1$，2，3，4，并且由于 $u=0$，不依赖于 V。

对于任意形式为 x_0 （32）的初始态， $s\in\{\pm1\}$，系统参数（Ω_1,等），以及 $T>0$，切换函数 $\mathcal{K}^u$ 是

$$\mathcal{K}^u(\overline{x}(t),\overline{p}(t))=0 \qquad \forall t\in[0,T]. \tag{37}$$

作为 $\overline{c}$ 的组成部分，控制 $u=\overline{u}=0$ 是奇异的。

考虑 ρ_0的两种情况：1） $\rho_0=$ 对角矩阵（1，0，0，0），即 $a_1=1$， $a_2=a_3=a_4=0$ 在（32）中（对于 $u=n_1=n_2=0$，对应点 $x_0=$ （1，十五个零）对于（14）是奇异的）；2） $\rho_0=\frac{1}{4}\mathbb{I}_4$（完全混合量子态），即 $a_1=a_2=a_3=a_4=\frac{1}{4}$ 在（32）中。

A) 当 $\rho_0=\text{diag}(1,\underline{0,0},0)$ 时。对于零控制，可得函数$\overline{x}_1=1$ 和 $\overline{x}_i=0$, $i=2$，16。切换函数变为

$$\mathcal{K}^{n_1}(\overline{x}(t),\overline{p}(t))=-2(b_1-b_3)se^{2\varepsilon\Omega_1(t-T)}\varepsilon\Omega_1, \tag{38}$$

$$\mathcal{K}^{n_2}(\overline{x}(t),\overline{p}(t))=-2(b_1-b_2)se^{2\varepsilon\Omega_2(t-T)}\varepsilon\Omega_2. \tag{39}$$

对于 (28,29)，我们用 $\overline{u}(t)$, $\overline{n}_i(t)$, $\overline{x}(t)$, $\overline{p}(t)$ 代替 $u^*(t)$, $n_i^*(t)$, $x^*(t)$, $p^*(t)$ 来考察，目标是为满足 (31) 的 b_1,b_2,b_3,b_4 制定充分条件，使得对于任意 $t\in[0,T]$ 及任意 $T\in(0,\infty)$，切换函数均为非正。因此，对于 (38, 39)，考虑代数方程组

$$(b_1-b_3)s\geq 0, \qquad (b_1-b_2)s\geq 0 \qquad \text{s.t.} \quad (31). \tag{40}$$

该系统通过 Wolfram Mathematica 中的函数 Reduce 求解。对于 $s=1$ （最大化重叠度问题），逻辑条件为

$$
\begin{aligned}
&\Big(\big(b_1=0\wedge b_2=0\wedge b_3=0\big)\vee\Big(0<b_1\leq\frac{1}{3}\wedge 0\leq b_2\leq b_1\wedge 0\leq b_3\leq b_1\Big)\\
&\vee\Big(\frac{1}{3}<b_1<\frac{1}{2}\wedge b_3\geq 0\wedge\Big(\big(2b_1+b_2>1\wedge b_1\geq b_2\wedge b_1+b_2+b_3\leq 1\big)\\
&\vee\big(b_1\geq b_3\wedge b_2\geq 0\wedge 2b_1+b_2\leq 1\big)\Big)\Big)\vee\Big(\frac{1}{2}\leq b_1\leq 1\\
&\wedge\Big(\big(b_2\geq 0\wedge b_1+b_2<1\wedge b_3\geq 0\wedge b_1+b_2+b_3\leq 1\big)
\end{aligned}
$$

$$\vee\Big(b_1+b_2=1\wedge b_3=0\Big)\Big)\Big)\Big)\wedge b_1+b_2+b_3+b_4=1. \tag{41}$$

这里“∧”表示逻辑“与”，“∨”表示逻辑“或”。这些条件保证$\mathcal{K}^{n_i}$对任意 $t\in[0,T]$ 均为非正，并与（37）一起，保证在类 PC（$[0,T]$; Q_{compact}）中满足庞特里亚金极大值原理条件（28，29）。该结果不依赖于V在 $H_{u(t)}=Vu$（t）中的取值。

对于 $s=-1$ （最小化重叠度问题），由（40）可得：

$$\begin{aligned}&\Big(\Big(b_1=0\wedge\Big(\Big(0\le b_2<1\wedge b_3\ge 0\wedge b_2+b_3\le 1\Big)\vee\Big(b_2=1\wedge b_3=0\Big)\Big)\Big)\\&\vee\Big(0<b_1\le\frac{1}{3}\wedge\Big(\Big(b_1\le b_2\wedge 2b_1+b_2<1\wedge b_1\le b_3\wedge b_1+b_2+b_3\le 1\Big)\\&\vee\Big(2b_1+b_2=1\wedge b_1+b_2+b_3=1\Big)\Big)\Big)\Big)\wedge b_1+b_2+b_3+b_4=1.\end{aligned} \tag{42}$$

这些条件与（37）结合，可满足（28、29）。

B）当 $\rho_0=\frac{1}{4}\mathbb{I}_4$ 时的情形。切换函数 K^{n_j}, $j=1$，2 变为

$$\mathcal{K}^{n_1}(\overline{x}(t),\overline{p}(t))=-\Big(e^{2\varepsilon\Omega_1 t}-1\Big)\Big(\Big(2e^{2\varepsilon\Omega_2 T}-1\Big)(b_1-b_3)+b_2-b_4\Big)s\Omega_1 E, \tag{43}$$

$$\mathcal{K}^{n_2}(\overline{x}(t),\overline{p}(t))=-\Big(e^{2\varepsilon\Omega_2 t}-1\Big)\Big(\Big(2e^{2\varepsilon\Omega_1 T}-1\Big)(b_1-b_2)+b_3-b_4\Big)s\Omega_2 E, \tag{44}$$

其中 $E=\varepsilon e^{-2\varepsilon(\Omega_1+\Omega_2)\ T}$。我们的目标是使$\mathcal{K}^{n_j}\le 0$， $j=1$，2 对任意 $t\in[0,T]$成立。如何利用（43、44）来构造相应的不等式约束，有一定的选择自由。对于 $s=1$，若考虑该系统

$$b_1-b_3\ge 0,\quad b_2-b_4\ge 0,\quad b_1-b_2\ge 0,\quad b_3-b_4\ge 0\qquad \text{s.t.}\quad (31),$$

这样可以推导出显式解，但结果相当繁琐。因此，对于$s=1$，我们采用以下较简单的代数方程组：

$$b_1-b_3=0,\quad b_2-b_4\ge 0,\quad b_1-b_2=0,\quad b_3-b_4\ge 0\qquad \text{s.t.}\quad (31) \tag{45}$$

其解为

$$\frac{1}{4}\le b_1\le\frac{1}{3}\wedge b_1=b_2\wedge b_1=b_3\wedge b_1+b_2+b_3+b_4=1. \tag{46}$$

这里，最大化问题 $J(c)$描述了系统末态的部分纯化。类比于 (45)，对于 $s=-1$ 考虑该系统

$$b_1-b_3=0,\quad b_2-b_4\le 0,\quad b_1-b_2=0,\quad b_3-b_4\le 0\qquad \text{s.t.}\quad (31)$$

其解为

$$0\le b_1\le\frac{1}{4}\wedge b_1=b_2\wedge b_1=b_3\wedge b_1+b_2+b_3+b_4=1. \tag{47}$$

C) 上述关于控制 $c=\overline{c}=0$ 满足庞特里亚金极大值原理（定理 1）的条件的结果，针对 ρ_0 两种情形，已用密度矩阵的术语概述如下定理。

定理 2 考虑具有控制 $c \in PC([0,T]; Q_{\text{compact}})$ 的系统 (2)，以及初始态 ρ_0 的两种情形：(1) 纯态 $\rho_0 = diag(1,0,0,0)$；(2) 完全混合态 $\rho_0 = \frac{1}{4}\mathbb{I}_4$。考虑以目标态 $\rho_{\text{target}} = diag(b)$ 为目标、对 $J(c)$ 进行最大化和最小化的问题，其中 $b = (b_1, b_2, b_3, b_4)$。那么，对于任意给定的厄米 V、系统参数（$\Omega_1 > 0$ 等）、$u_{\min} < 0 < u_{\max}$ 和 $n_{\max} > 0$，以及任意 $T > 0$，只要向量 b 如下，控制 $c = \bar{c} = 0$ 在类 $PC([0,T]; Q_{\text{compact}})$ 中满足庞特里亚金极大值原理：

- 对于 $\rho_0 = \text{diag}(1,0,0,0)$：对于最大化 $J(c)$ 的问题，若 b 满足式（41）；对于最小化 $J(c)$ 的问题，若 b 满足式（42）；
- 对于 $\rho_0 = \frac{1}{4}\mathbb{I}_4$：对于最大化 $J(c)$ 的问题，若 b 满足式（46）；对于最小化 $J(c)$ 的问题，若 b 满足式（47）。

4.4 重叠度的下界与上界

在最优控制的一般理论中，一个重要问题是确定满足庞特里亚金极大值原理（PMP）的控制是否确实是全局最优的。对于目标函数 $\langle \rho(T)\ \rho_{\text{target}} \rangle$，其下界与上界显然是有限维优化问题中的极值 $\langle \rho, \rho_{\text{target}} \rangle \to$ 的最小值和 $\langle \rho, \rho_{\text{target}} \rangle \to$ 的最大值，分别对应所有密度矩阵上的优化，例如参见 [48, p. 2])。下面将用我们的术语进行讨论。

对于对角目标密度矩阵 $\rho_{\text{target}} = \text{diag}(b_1, b_2, b_3, b_4)$，有 $\text{h}\rho, \rho_{\text{target}}\text{i} = 4\sum_{j=1} b_j \rho_{j,j}$ 且 $\text{F}(x; x_{\text{target}}) = \text{h}x, \beta \circ x_{\text{target}}\text{i} = \sum_{j=1}^{8}, ,13,_{16} x_j x_{\text{target},j} \to$ 最小值或最大值，满足 and (13) $x_j \geq 0,\ j = 1, 8, 13, 16$。因此，对于对角情形，重叠度 $\text{h}\rho, \rho_{\text{target}}\text{i}$ 的最小值和最大值分别等于 ρ_{target} 的最小和最大特征值。对于非对角ρ_{target}，将重叠度 $\text{h}\rho, \rho_{\text{target}}\text{i}$ 最大化的问题可通过对角化 $\rho_{\text{target}} = U\rho^{\text{diag}}\text{target}U^\dagger$并得到对角$\rho^{\text{diag}}\text{target}$，结合幺正变换 U，化简为对角情形；同时利用以下等式：$\max_\rho \text{Tr}(\rho\rho_{\text{target}}) = \max_\rho \text{Tr}(\rho U\rho^{\text{diag}}\text{target}U\dagger) = \max_\rho \text{Tr}(U\dagger\rho U\rho^{\text{diag}}\text{target}) = \max_\rho \text{Tr}(\rho\rho^{\text{diag}}\text{target})$，其中最后一个等式成立，是因为所有密度矩阵组成的集合在幺正变换 $\rho \to U^\dagger\rho U$ 下保持不变。对最小化重叠度的问题也可进行类似分析。因此，对于一般的 ρ_{target}，目标函数的下界和上界可分别取为 ρ_{target}的最小和最大特征值。

可以预期，在给定终止时间 T 的情况下，可能存在这样的情形：无法通过类 $PC([0,T]; Q_\infty)$ 或 $PC([0,T]; Q_{\text{compact}})$ 中的任何控制，至少近似地达到这样的下界或上界。然而，如果使用某些 ρ_{target} 和 T 对目标函数进行极大化，并以较高精度得到目标函数达到上界的结果，那么就可以得出结论：该最大化问题至少在近似意义上已得到全局求解。

4.5 当零相干控制和非相干控制构成驻点时

若某容许控制 $\tilde{c} = (\tilde{u}, \tilde{n}_1, \tilde{n}_2)$ 在某个子集 $\Omega \subseteq [0,T]$（$\text{mes}\,\Omega > 0$）上满足：$h(\tilde{x}(t)\ \tilde{p}(t)\ u, n_1, n_2)$ 在 Ω 上不依赖变量 u, n_1, n_2，即 $h(\tilde{x}(t)\ \tilde{p}(t)\ u, n_1, n_2) - h(\tilde{x}(t)\ \tilde{p}(t)\ \tilde{u}(t)\ \tilde{n}_1(t)\ \tilde{n}_2(t)) \equiv 0$，则称其为一阶奇异（也记作“奇异”）[86]，

$t \in \Omega$。由于函数 h 关于 u, n_j 是线性的，这一定义意味着 $\mathrm{K}^u(u(t)-\tilde{u}(t))+2\sum_{j=1}^{} \mathrm{K}^{n_j}(n_j(t) - \tilde{n}_j(t)) \equiv 0$，且所有函数 $\mathrm{K}^u(\tilde{x}(t)\ \tilde{p}(t)) \equiv 0$、$\mathrm{K}^{n_j}(\tilde{x}(t)\ \tilde{p}(t)) \equiv 0$。换言之，关于变量 u, n_1, n_2 取最大值的函数 $h(\tilde{x}(t)\ \tilde{p}(t)\ u, n_1, n_2)$ 不依赖这些变量。由于该问题关于控制是线性的，控制在整个时间范围内奇异（即 $\Omega = [0,T]$）的定义与以切换函数表示的 $J(c)$ 的驻点定义一致。

设为 $\rho_0 = \mathrm{diag}(1,\ 0,\ 0,\ 0)$。下面我们求出条件，使得在整个 $[0,T]$ 区间内，控制 $c = \bar{c}$的所有切换函数均为零。利用（40），考虑代数方程组 $b_1 - b_3 = 0$, $b_1 - b_2 = 0$ 满足（31）。求解该方程组，可得关于两者的复合条件 $s = \pm 1$:

$$0 \le b_1 \le \frac{1}{3} \ \wedge\ b_1 = b_2 = b_3 \ \wedge\ b_4 = 1 - 3b_1. \tag{48}$$

然后利用（37），我们用密度矩阵表述得到以下定理 .

定理 3（零控制作为 $J(c)$ 的驻点）。考虑系统（2），其中$\rho_0 = diag(1, 0, 0, 0)$, $c \in PC([0,T]; Q_{\mathrm{compact}})$ 或 $c \in PC([0,T]; Q_\infty)$。考虑以目标态 $\rho_{\mathrm{target}} = diag(b_1, b_2, b_3, b_4)$ 为目标的 $J(c)$ 最大化和最小化问题。对于任意给定的厄米 V、系统参数（$\Omega_1 > 0$ 等）、$u_{\min} < 0 < u_{\max}$ 和 $n_{\max} > 0$（若 $Q = Q_{\mathrm{compact}}$，则使用这些界），以及任意 $T > 0$，如果向量 (b_1, b_2, b_3, b_4) 满足条件（48），则控制 $c = \bar{c} = 0$ 是 $J(c)$ 在 $PC([0,T]; Q_{\mathrm{compact}}) \subset PC([0,T]; Q_\infty)$ 中的驻点。

定理2 与3 的比较可以展示控制约束的影响。可以设想这样一种情况：控制 $c = \bar{c} = 0$ 不是 $J(c$的驻点，但根据定理2，该控制可能成为最优控制的候选。

4.6 零奇异相干与非相干控制恰好最优时的解析研究

关于定理2和定理3，考虑 $\rho_0 = \mathrm{diag}(1, 0, 0, 0)$和 $\rho_{\mathrm{target}} = \frac{1}{5}\mathrm{diag}(1, 1, 1, 2)$，它们满足(48)，即控制 $\bar{c} = 0$ 是 $J(c)$的驻点。如(34)所示，$\bar{c}$给出 $\bar{x}_1(t) \equiv a_1 = 1$, $\bar{x}_j(t) \equiv 0$, $j = 2$, 16，因此我们通过解析方法得到，对于任意 T，$J(\bar{c}) = \mathrm{h}x(T)\ \beta \circ x_{\mathrm{target}}\mathrm{i} = a_1 x_{\mathrm{target}}$, $_1 = b_1 = 1/5$。对于此 ρ_{target}，根据第4.4小节可得，$J(c)$的下界与上界分别为1/5和2/5。

对于最小化 $J(c)$ 的问题，我们得到驻点 $\bar{c} = 0$ 提供了 $J(\bar{c}) = 1/5$，其值恰好等于任意 $T > 0$、厄米 V 等情况下的上界。这意味着 $\bar{c} = 0$ 恰好是全局最优的，$J(\bar{c})$ 是 $J(c)$ 的全局最小值。

对于最大化 $J(c)$ 的问题，我们看到，驻点 $\bar{c} = 0$ 处的值 $J(\bar{c})$ 是任意 T 的上界的一半。我们针对 $T = 2$ 给出以下数值示例。令控制 $u = 10\sin t$, $n_1 = n_2 = 0$, $t \in [0, 2]$，取值为 $\varepsilon = 0.1$, $\omega_1 = 1$, $\omega_2 = \Omega_j = 0.5$, $\Lambda_j = 0.05$, $j = 1, 2$。数值求解 (14)，得到 $J(c) \approx 0.37 > J(\bar{c}) = 0.2$。在我们的问题中，庞特里亚金极大值原理并非最优性的充分条件。

5 梯度投影方法

考虑要最小化的目标泛函 $I(c)$，其中，正如第 3 节所述， $I(c)$ 可以是 $\overline{J} - J(c)$、 $J(c)$、J_M,2(c) 或 J_M^θ,1(c)。就控制的顺序更新而言，先设定一个可行初始猜测 $c = c^{(0)} = (u^0, n_1^{(0)}, n_2^{(0)})$，并旨在构造这样的序列 $c^{(0)}, c^{(1)}, \ldots, c^{(k)}, \ldots, c^{(M)}$，使相应的 $I(c)$ 值单调递减（$I(c^{(k+1)}) < I(c^{(k)})$，或总体上递减。考虑当前控制 $c^{(k)}$, $k \geq 0$ 以及任意一个容许控制 c。根据最优控制理论中的相应一般结果 [73, 74], ，可得展开式

$$
\begin{aligned}
I(c) - I(c^{(k)}) &= \left\langle \operatorname{grad} I(c^{(k)}), c - c^{(k)} \right\rangle_{L^2} + r = -\int_0^T \Big[\mathcal{K}^u(p^{(k)}(t), x^{(k)}(t))(u(t) - u^{(k)}(t)) \\
&\quad + \sum_{j=1}^{2} \mathcal{K}^{n_j}(p^{(k)}(t), x^{(k)}(t))(n_j(t) - n_j^{(k)}(t)) \Big] dt + r, \qquad (49) \\
\operatorname{grad} I(c^{(k)})(t) &= -h_c(p, x, c)\Big|_{p=p^{(k)}(t),\ x=x^{(k)}(t),\ c=c^{(k)}(t)} \\
&= \left(\mathcal{K}^u(p^{(k)}(t), x^{(k)}(t)), \quad \mathcal{K}^{n_j}(p^{(k)}(t), x^{(k)}(t)), \quad j = 1, 2 \right).
\end{aligned}
$$

其中 r 是余项，grad $I(c^{(k)})$ 是 $I(c)$ 在 $c^{(k)}$ 处的梯度，而该梯度是在整个 $[0, T]$ 上定义的向量值函数。

对于最小化 $I(c)$ 的问题，考虑以下从一个可行的 $c^{(0)}$ 出发的 GPM- 2 迭代过程:

$$
c^{(k+1)}(t) = \Pr_Q \Big(c^{(k)}(t) - \alpha^{(k)} \operatorname{grad} I(c^{(k)})(t) + \beta \left(c^{(k)}(t) - c^{(k-1)}(t) \right) \Big), \qquad (50)
$$

其中 $Q = Q_\infty$ 或 $Q = Q_{\text{compact}}$；若 $k = 0$，则使用 $\alpha^{(0)} > 0$、 $\beta = 0$；若 $k > 0$，则使用 $\alpha^{(k)} > 0$、 $\beta \in$ (0,1)；正交投影 Pr$_Q$ 将 Q 外的任意点映射到 Q 中距离最近的点，并保持 Q 中的点不变。具体来说，我们有

$$
\begin{aligned}
u^{(1)}(t) &= \Pr_{Q_u} \left(u^{(0)}(t) + \alpha^{(0)} \mathcal{K}^u(p^{(0)}(t), x^{(0)}(t)) \right), \qquad (51) \\
n_j^{(1)}(t) &= \Pr_{Q_{n_j}} \left(n_j^{(0)}(t) + \alpha^{(0)} \mathcal{K}^{n_j}(p^{(0)}(t), x^{(0)}(t)) \right), \qquad (52) \\
u^{(k+1)}(t) &= \Pr_{Q_u} \Big(u^{(k)}(t) + \alpha^{(k)} \mathcal{K}^u(p^{(k)}(t), x^{(k)}(t)) + \beta(u^{(k)}(t) - u^{(k-1)}(t)) \Big), \qquad (53) \\
n_j^{(k+1)}(t) &= \Pr_{Q_{n_j}} \Big(n_j^{(k)}(t) + \alpha^{(k)} \mathcal{K}^{n_j}(p^{(k)}(t), x^{(k)}(t)) + \beta(n_j^{(k)}(t) - n_j^{(k-1)}(t)) \Big), \qquad (54)
\end{aligned}
$$

其中 $k \geq 1$； $j = 1, 2$； $Q_u = \mathbb{R}$ 或 $Q_u = [u_{\min}, u_{\max}]$, $Q_{n_j} = [0, \infty)$ 或 $Q_{n_j} = [0, n_{\max}]$; 参数 $\alpha^{(k)} > 0$ ($k = 0, 1, 2, \ldots$) 和 $\beta \in$ (0, 1) 应进行调整。例如，可以尝试将 $\alpha^{(k)} > 0$ 固定为适用于整个迭代集合的值。另一种规则是 $\alpha^{(k)} = \widehat{\alpha}/(k^\sigma + 1)$，其中 $\widehat{\alpha}$, $\sigma > 0$。如 (51, 52) 所示，GPM-2 的第一次迭代与 GPM-1 的第一次迭代一致。注意 (53, 54) 中的惯性项 $\beta(u^{(k)}(t) - u^{(k-1)}(t))$ 和 $\beta(n_j^{(k)}(t) - n_j^{(k-1)}(t))$。另请注意，对于最小化和最大化问题，(50) 中梯度前的符号“–”相同，因为这两个问题之间的差异已在 (25) 中考虑。一般而言，我们不期望 GPM-1 和 GPM-2 在每次迭代中都给出 $I(c^{(k+1)}) < I(c^{(k)})$。

考虑停止准则 $|I(c^{(k+1)})-I(c^{(k)})|<\varepsilon_{\text{stop},1}\ll 1$。此外，对于最小化问题 $I=J^{\theta}_{M,1}(c)$，还需考虑停止准则 $J^{\theta}_{M,1}<\varepsilon_{\text{stop},2}\ll 1$。对于最小化 $I=J^{\theta}_{M,1}(c)$，我们在停止准则$J_{M,1}(c)<\varepsilon_{\text{stop},3}$ 中使用 $J_{M,1}(c)$。

根据构造，$\frac{1}{T}\int_0^T\sum_{j=1}^{4}\rho_{j,\,j}(t)dt=\frac{1}{T}\int_0^T\sum_{j=1}^{8}{}_{,\ ,\ 13,\ 16}{}^{x_j}(t)dt=1$。令

$$\aleph:=\frac{1}{T}\int_0^T\sum_{i,j=1,2,3,4,\ i<j}|\rho_{i,j}(t)|^2dt=\frac{1}{T}\int_0^T\sum_{j=\overline{2,15}\setminus\{8,13\}}x_j^2(t)dt$$
$$\approx\frac{1}{T}\sum_{j\in\overline{2,15}\setminus\{8,13\}}x_j^2(t_q)\Delta t=\frac{1}{K}\sum_{j\in\overline{2,15}\setminus\{8,13\}}x_j^2(t_q),$$

其中 $\Delta t=T/K$ 取足够大的 $K\in\mathbb{N}$。

6 使用 GPM-1 和 GPM-2 的数值结果

考虑 (6) 中定义的 $V=V_1$ 或 $V=V_2$。与第4.6小节一样，使用 $\varepsilon=0.1$,$\omega_1=1$, $\omega_2=\Omega_j=0.5$, $\Lambda_j=0.05$, $j=1,2$。下文所述的数值实验未采用有限维优化。实验使用我们以 Python 实现的 GPM，并使用来自 `SciPy` 的 `solve_ivp` 等。作为一种选择，取 $Q=Q_\infty$。在停止准则中，取$\varepsilon_{\text{stop},1}=10^{-8}$（在第6.1–6.3小节中）以及$\varepsilon_{\text{stop},j}=10^{-4}$, $j=2,3$（在第6.3小节中）。分析各类数学方面很有意思，例如，关于定理 2，考察第6.1、6.2小节中 $\{c^{(k)}\}$ 趋于零的收敛性。

6.1 混合态下最大化重叠度 ρ_{target}

考虑 $\rho_0=\frac{1}{4}\mathbb{I}_4$和 $\rho_{\text{target}}=\frac{1}{10}\text{diag}(7,1,1,1)$。熵 $S(\rho_{\text{target}})\approx 0.94$约为完全混合态 ρ_0 的熵的 68%。考虑 $V=V_1$。对于这个 ρ_{target}，利用第 4.4 小节可得，$J(c)$的上界为 0.7。对于这个 $\rho_0=\frac{1}{4}\mathbb{I}_4$，$c=\overline{c}=0$和 $T=70$，利用式 (34) 计算得出 $J(\overline{c})\approx 0.6994$，即足够接近 0.7。这与式 (35) 和 (36) 一致。对于最大化 $J(c)$的问题，我们使用目标函数 $I(c):=0.6995-J(c)$ 作为最小化目标。

取 $T=70$。设置由 $n_1^{(0)}=n_1^{(0)}=10$、$u^{(0)}=0$ 构成的 $c^{(0)}$，它们给出 $I(c^{(0)})\approx 0.43$。我们使用 GPM-1、GPM-2，并采用此 $c^{(0)}$，同时固定 $\alpha^{(k)}=10^5$、$\beta=0.9$。出于计算需要，考虑步长为 T/N、具有 $N=1000$ 的均匀时间网格。对 $u,\ n_j$ 采用分段常数插值。求解 73 个柯西问题（针对 (14, 24)）后，GPM-2 给出 $I\approx 6\cdot 10^{-4}$，即 $I(c^{(0)})$ 的近 0.1 %，$\aleph\approx 0$。图 2 展示了使用 GPM-2 得到的结果。如图 2(a) 所示，$\rho(T)$ 与 ρ_{target}相差较大。为便于比较，对所有位于 (50) 中的 k 使用 GPM-1（即 $\beta=0$），并对所有 k 使用 $\alpha^{(k)}=10^5$。对于相同的 $\varepsilon_{\text{stop},\ 1}$，GPM-1 也能给出 $I\approx 6\cdot 10^{-4}$，但需要求解 87 个柯西问题。因此，在相同的固定 $\alpha^{(k)}$ 下，采用 $\beta=0.9$ 的 GPM-2 比 GPM-1 更快。

6.2 纯态 ρ_{target}的最大化重叠

考虑 $\rho_0=\frac{1}{4}\mathbb{I}_4$、$V=V_1$。我们不考虑冯·诺依曼熵为 0.94 的 $\rho_{\text{target}}=\text{diag}(0.7,0.1,0.1,0.1)$，而考虑冯·诺依曼熵为零的 $\rho_{\text{target}}=\text{diag}(1,0,0,0)$（因为

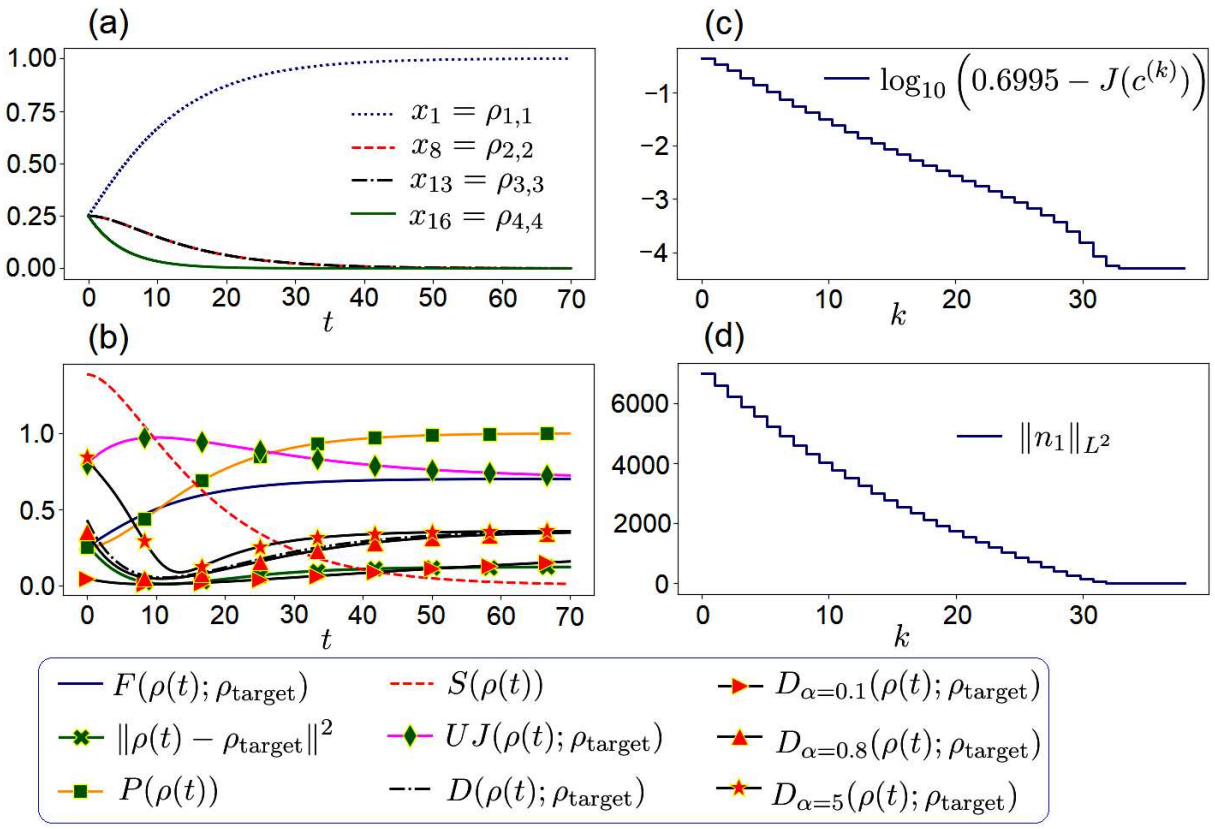

图 2：GPM-2 在最大化 $J(c)$ 问题中的结果，其中 $\rho_0 = \frac{1}{4}\mathbb{I}_4$和 $\rho_{\text{target}} = \frac{1}{10}\text{diag}(7, 1, 1, 1)$：(a) t的函数 $\rho_{j,j}(j = 1, 2, 3, 4)$，其中 $\rho_{1,1} \approx 1$和 $\rho_{j,j} \approx 0\,(j = 2, 3, 4)$ 在 $t = T$；(b) 优化后的 c处的演化：重叠度$F(\rho(t); \rho_{\text{target}})$ 在 $t = T$处以较高精度达到上界 0.7，平方距离 $\|\rho(t)-\rho_{\text{target}}\|^2$, 纯度在 $t = T$处达到 ≈ 0.998，冯·诺依曼熵在 $t = T$处达到≈ 0.008，Uhlmann–Jozsa 保真度、量子相对熵、Petz–Rényi 相对熵，其中 $\alpha = 0.1, 0.8, 5$；(c) GPM-2 迭代过程中$_{10}$ 对数尺度下 I 随指标 k 单调递减；(d) n_1的 L^2-范数随 k单调递减。

线性熵 $1 - P(\rho_{\text{target}})$ ）。对于这个 ρ_{target}，使用第 4.4 节，我们计算得到，$J(c)$ 的上界为 1（而不是 0.7）。这与（35）和（36）一致。

定义 $I(c) = 1 - J(c)$，取 $T = 100$。为在计算机中存储控制，将 $[0, T]$ 划分为 $N = 1000$个等长片段。设定 $n_1^{(0)} = n_1^{(0)} = 10$ 和 $u^{(0)} = 0$，使得 $J(c^{(0)}) \approx 0.27$，$I(c^{(0)}) \approx 0.73$。我们使用 GPM-1 、 GPM-2，并采用此 $c^{(0)}$，固定 $\alpha^{(k)} = 10^5$ 、 $\beta = 0.9$。在求解 119 个柯西问题的代价下，GPM-2 得到 $I(c) \approx 5 \cdot 10^{-5}$，א ≈ 0。图 3(a) 展示了数值优化后的函数 $\rho_{j,\ j}(j = 1, 2, 3, 4)$，它们与图 2(a) 所示函数相似。与图 2(b) 不同，我们从图 3(b) 可见，$F(\rho(t); \rho_{\text{target}}) \approx 1$在 $t = T$处，而 $\|\rho(t) - \rho_{\text{target}}\|^2 \approx 0$在 $t = T$处。也就是说，与前一种非纯态 ρ_{target}的情况相比，此处重叠度约为 1，距离在适当的 T处约为 0。此处，最大化 $\|\rho(T) \rho_{\text{target}}\|$ 也能实现近似的 $\rho_0 \to \rho_{\text{target}}$ 控制。作为比较，我们使用具有相同 $\alpha^{(k)}$的 GPM-1。在求解 141 个柯西问题的代价下，GPM-1 得到 $I(c) \approx 5 \cdot 10^{-5}$，即采用 $\beta = 0.9$ 的 GPM-2 比 GPM-1 更快。

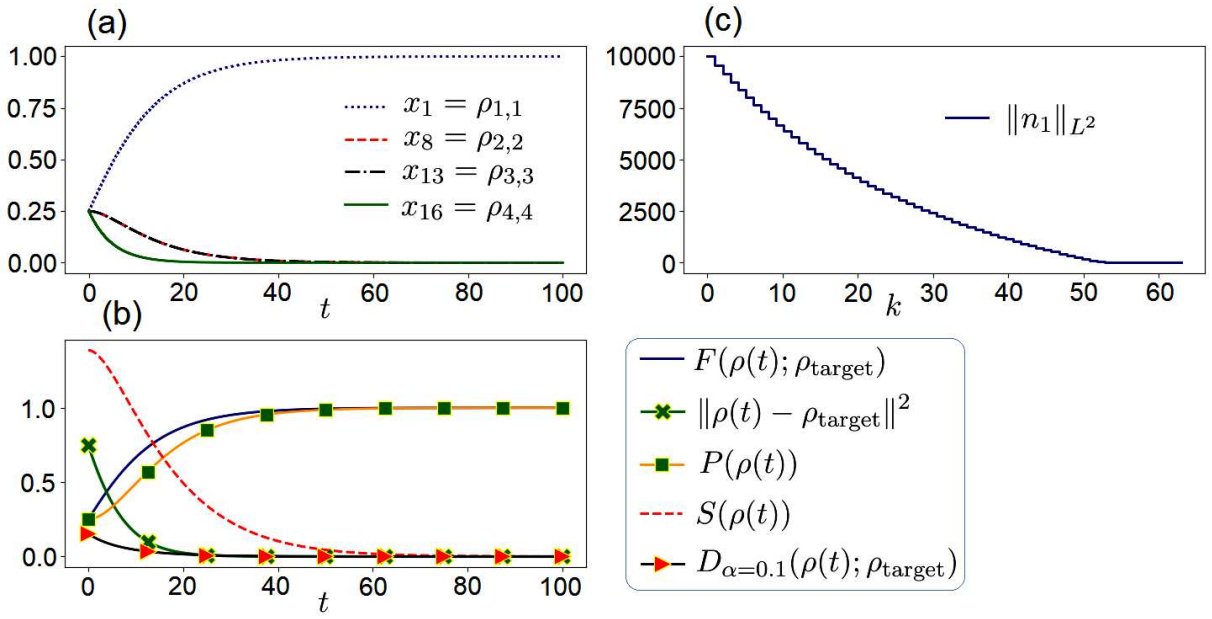

图3：GPM-2 在最大化与最大混合态 $\rho_0 = \frac{1}{4}\mathbb{I}_4$ 和纯态 $\rho_{\text{target}} = \text{diag}(1, 0, 0, 0)$ 的重叠度 $\text{h}\rho(T)\ \rho_{\text{target}}\text{i}$ 时的结果。

表1：GPM-2 在最大化 $(\rho_{\text{target}}, T)$ 两种变体的重叠度问题上的工作（第6.1、6.2节）

情形 $(\rho_{\text{target}}, T)$ / 数据和结果	(混合态，70)	(纯态，100)
$(J(c^{(0)})\ I(c^{(0)}))$ – 初始值	$\approx$ (0。27，0。43)	$\approx$ (0.27,0.73)
$\overline{J}$用于定义 $I(c) = \overline{J} - J(c)$	0.6995	1
$(\alpha^{(k)}, \beta)$	$(10_5, 0.9)$	$(10_5, 0.9)$
柯西问题的求解次数	73	119
$I(c)$在获得的 c处	$\approx 6 \cdot 10^{-4}$	$\approx 5 \cdot 10^{-5}$
在获得的 c处的א	≈ 0	≈ 0
对应的图和小节	图2，第 6.1	图3，第 6.2
$S(\rho(T)) \approx 0$ 在获得的 c	Yes	Yes
$\text{h}\rho(T)\ \rho_{\text{target}}\text{i} \approx 1$ 在获得的 c	No	Yes

表 1 总结了第 6.1、6.2 小节中 GPM-2 工作的信息。鉴于这些情况下 I 的结果值明显不同，请注意，使用了带有 $\varepsilon_{\text{stop},1} = 10^{-8}$ 的停止准则。

6.3 将重叠度引导至给定值

考虑纯态 $\rho_0 = \text{diag}(0, 1, 0, 0)$ 和 $\rho_{\text{target}} = \text{diag}(0, 0, 1, 0)$，算符 V 为 V_1 或 V_2，而 T 为 0.5 或 0.1，即有四种情形：(V, T)。

对于将 h$\rho(T)$ ρ_{target}i 驱动至 $M = 0.5$ 的问题，我们使用 $I = J^{\theta}_{M}$,1(c)，其中 $\theta = 10^{-4}$。如式 (18) 所示，如果 |F ($x(T)$; x_{target}) $- M| \le \theta$，我们就使用对 J_M,1(c) 的取值进行上界估计的二次函数。对于 GPM-2，使用 $\alpha^{(k)} = \hat{\alpha}/(k^{\sigma} + 1)$，其中 $\sigma = 1.5$, $\beta = 0.92$ 用于所有计算，而 $\hat{\alpha}$ 则针对四种情形分别指定。令 $u^{(0)} =$ sin t, $n_1^{(0)} = n_2^{(0)} = 0$ u n_1 n_2 $[0, T]$ $N = 500$ 。为在计算机中存储 , ,, 将 分成$T = 0.5$ 个部分，并将 分成 $N = 100$ 个部分，以便对 $T = 0.1$ 使用分段常数插值。$\hat{\alpha}$ 的取值以及 GPM-2 的结果见表 2、图4、5。可以看到，在四种情形中的每一种情形下，GPM-2 都能使 J^{θ}_{M},1 足够接近 0。

表 2：GPM-2 对重叠度操控问题的研究（第 6.3 节）

数据和结果 \ 情形 (V, T)	(V_1, 0.5)	(V_1, 0。1)	(V_2, 0.5)	(V_2, 0。1)
$I(c^{(0)})$ – 初始值	≈ 0.5	≈ 0.5	≈ 0.5	≈ 0.5
$\hat{\alpha}$ 在 $\alpha^{(k)}$的公式中	1	100	1	5
$J_{M,\ 1}(c)$ 在所得到的 c 处	$\approx 6 \cdot 10^{-5}$	$\approx 5 \cdot 10^{-5}$	$\approx 6 \cdot 10^{-5}$	$\approx 6 \cdot 10^{-5}$
求解次数 柯西问题	169	243	345	275
在所得的 c 处的 א	≈ 0.21	≈ 0.21	≈ 0.11	≈ 0.12
对应图	图4, 左栏。	图5, 左栏。	图4, 右栏。	图 5, 右列。

对于 $V = V_1$，比较图 4、5 中的左列可以看出，对于两种 T 变体，相同的 $j \in$ {1、2、3、4} 所对应的结果 $\rho_{j,\ j}$彼此相似；而对于较小的 T，所有得到的控制值都呈递增趋势。在图 4 中，比较针对相同 $T = 0.5$ 获得的 $V = V_1$ （左列）和 $V = V_2$ （右列）的结果，可以看到得到的控制等方面存在显著差异。这就是对 $V = V_2$ 使用 $T = 0.1$ 的原因。相应结果显示在图 5 的右列中，其中，在得到的 c 下，$\rho_{j,\ j}$(j = 1、2、3、4)、$F^{\theta}_{M,\ 1}(\rho(t);\ \rho_{\text{target}})$ 和$P(\rho(t))$ 的图形要精确得多。这些观察结果表明，比较各种数值优化的控制过程时，应重视其结构。

7 结论

本文研究了双量子比特系统的最优态操控问题。该系统的动力学由 Gorini–Kossakowski–Sudarshan–Lindblad 主方程支配，其中相干控制进入哈密顿量，非相干控制则同时进入哈密顿量（通过兰姆位移）和耗散超算子。我们利用了两类在物理上不同的相干控制相互作用，并考虑希尔伯特–施密特重叠度 $\langle \rho(T)\ \rho_{\text{target}} \rangle$ between final ($\rho(T)$) and target (ρ_{target}) density matrices.We consider the problems ofmaximizing and minimizing the overlap and the problemof steering the overlap to a given admissible value. Forthe problems of optimizing theoverlap, Theorem 1 contains the PMP, Theorem 2 contains conditions for ρ_0 and ρ_{target}

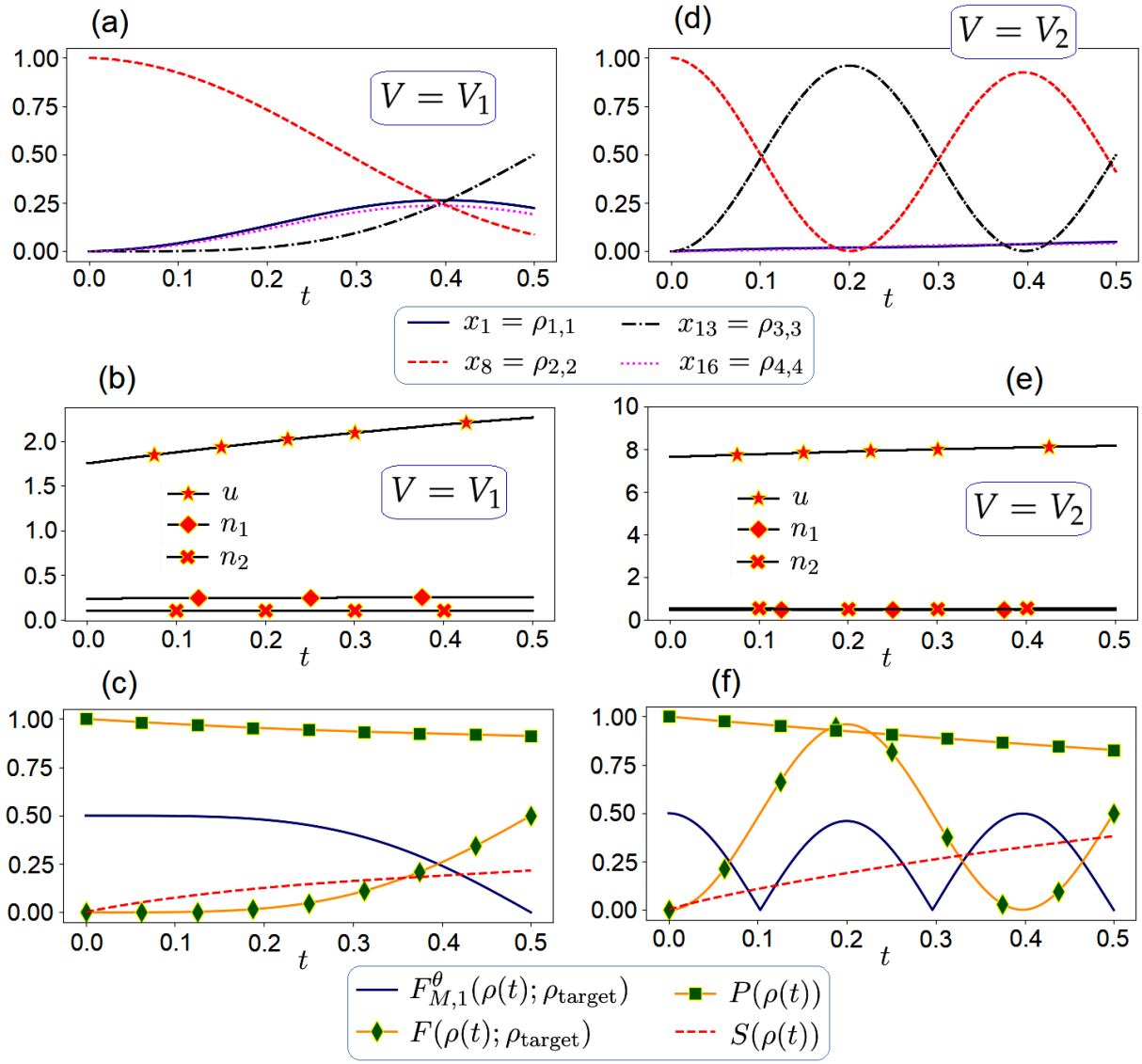

图 4：GPM-2 对最小化 $J^{\theta}_{M,\,1}(c)$ 的结果，其中 $\rho_0 = \text{diag}(0,\ 1,\ 0,\ 0)$,$\rho_{\text{target}} = \text{diag}(0,\ 0,\ 1,\ 0)$, V要么为 V_1，要么为 V_2，且 $T = 0.5$。

使零相干与非相干控制满足 PMP；定理 3 给出了使 ρ_0 和 ρ_{target} 成立的条件，即使零控制成为目标泛函驻点的条件。第 4.4小节总结了已知的重叠度界限。对于全局优化，这些界限可用于解析处理（第 4.6小节）和数值处理。第 5节介绍了采用分段连续控制的一步和两步 GPM，用于最大化重叠度以及将重叠度引导至给定值的问题。第 6 节给出了以下示例：量子系统本身包含足以在无外部控制的情况下实现控制目标的资源（即零相干与非相干控制为最优控制）；梯度方法以一步和两步 GPM 的形式在我们的数值实验中取得了成功；相干控制与非相干控制可以同时具有非平凡作用；对于不同终止时间，所计算控制的曲线可能表现出本质上的差异。

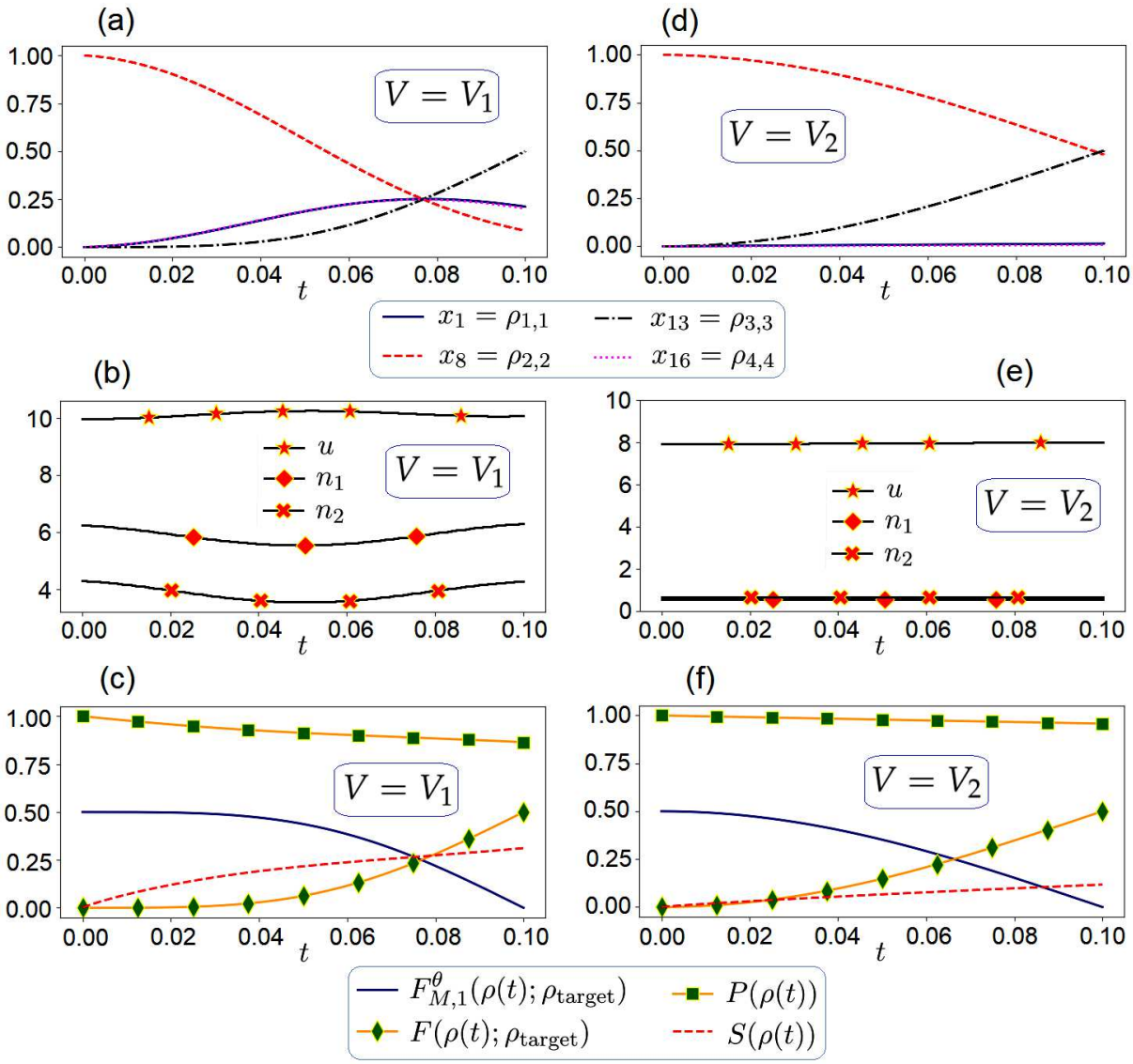

图5：GPM-2最小化 $J^{\theta}_{M,1}(c)$，其中 $\rho_0 = \text{diag}(0,1,0,0)$,$\rho_{\text{target}} = \text{diag}(0,0,1,0)$，$V$要么是 V_1，要么是 V_2，且 $T = 0.1$。

致谢。第 2 节的工作在斯捷克洛夫数学研究所完成，并得到俄罗斯科学基金会项目（编号22-11-00330）的资助，https://rscf.ru/en/project/22-11-00330/。其他工作部分得到MIAN项目以及联邦学术领导力计划“Priority 2030”（MISIS战略项目“量子互联网”）的资助。

参考文献

[1] Koch, C.P., Boscain, U., Calarco, T., Dirr, G., Filipp, S., Glaser, S.J., Kosloff, R., Montangero, S., Schulte-Herbrüggen, T., Sugny, D., Wilhelm, F.K.：量子技术中的量子最优控制。关于欧洲研究现状、愿景与目标的战略报告。EPJ Quantum Technol. 9, 19（2022年）。https://doi.org/10.1140/epjqt/s40507-022-00138-x

[2] Butkovskiy, A.G., Samoilenko, Yu.I.：量子力学过程与系统的控制 / 由俄语译出。Kluwer 学术出版社，多德雷赫特（1990年）[3]Tannor, D.J.：量子力学导论：含时视角。大学科学出版社，索萨利托（2007年）。https://uscibooks.aip.org/books/introduction-to-quantum-mechanics-a-time-depend

[4]Fradkov, A.L.：《控制论物理学：从混沌控制到量子控制》。施普林格，柏林、海德堡（2007年）。https://doi.org/10.1007/978-3-540-46277-4[5] Wiseman, H.M., Milburn, G.J.：《量子测量与控制》。剑桥大学出版社，剑桥（2009年）。https://doi.org/10.1017/CBO9780511813948[6]Brif, C., Chakrabarti, R., Rabitz, H.：量子现象控制：过去、现在与未来。《新物理学杂志》**12**(7), 075008（2010年）。https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/7/075008

[7]Bonnard, B., Sugny, D.：《最优控制及其在空间和量子动力学中的应用》。AIMS，斯普林菲尔德（2012年）。https://www.aimsciences.org/book/AM/volume/21

[8]Koch, C.P.：控制开放量子系统：工具、成果与局限。《物理学杂志：凝聚态物质》**28**(21), 213001（2016年）。https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/21/213001

[9]D'Alessandro, D.：《量子控制与动力学导论》。第二版。Chapman and Hall/CRC，博卡拉顿（2021年）。https://doi.org/10.1201/9781003051268

[10] Kuprov, I.：《自旋：从基本对称性到量子最优控制》。施普林格，尚（2023年）。https://doi.org/10.1007/978-3-031-05607-9

[11]Palao, J.P., Kosloff, R.：通过用于酉变换的最优控制算法实现量子计算。《物理评论快报》**89**(18), 188301（2002年）。https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.188301

[12]Treutlein, P.、Hänsch, T.W.、Reichel, J.、Negretti, A.、Cirone, M.A.、Calarco, T.：原子芯片上的微波势与鲁棒量子门的最优控制。《物理评论A》**74**(2), 022312（2006年）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.022312

[13]Grace, M.、Brif, C.、Rabitz, H.、Walmsley, I.A.、Kosut, R.L.、Lidar, D.A.：相互作用的二能级粒子系统中的量子门最优控制与退相干抑制。J. Phys. B.**40**(9)，S103（2007年）。https://doi.org/10.1088/0953-4075/40/9/S06。

[14]Wu, R., Chakrabarti, R., Rabitz, H.：连续变量量子门的最优控制理论。《物理评论A》**77**，052303（2008年）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.77.052303

[15] Poulsen, U.V., Sklarz, S., Tannor, D., Calarco, T.：通过最优控制纠正推动离子量子门中的错误。《物理评论A》82(1)，012339（2010年）。
https://doi.org/10.1103/PhysRevA.82.012339

[16]Pechen, A.N.、Ilin, N.B.：量子比特超快操控的控制景观。《物理学杂志A》50(7)，75301（2017年）。https://doi.org/10.1088/1751-8121/50/7/075301

[17] Basilewitsch, D.、Cosco, F.、Lo Gullo, N.、Möttönen, M.、Ala-Nissilä, T.、Koch, C.P.、Maniscalco, S.：使用量子最优控制进行储备库工程以实现量子比特重置。《新物理学杂志》21，093054（2019年）。 https://doi.org/10.1088/1367-2630/ab41ad

[18]Arute, F., Arya, K., Babbush, R., 等：使用可编程超导处理器实现量子霸权。《自然》574，505–510（2019年）。https://doi.org/10.1038/s41586-019-1666-5[19] Riaz, B., Shuang, C., Qamar, S.：量子门制备的最优控制方法：比较研究。《量子信息处理》18，100（2019年）。https://doi.org/10.1007/s11128-019-2190-0[20] Volkov, B.O., Morzhin, O.V., Pechen, A.N.：超快生成单量子比特相移量子门的量子控制景观。《物理学杂志A》54(21)，215303（2021年）。
https://doi.org/10.1088/1751-8121/abf45d[21] Volkov, B.O., Pechen, A.N.：关于快速生成单量子比特相移门的量子控制景观详细结构。《俄罗斯科学院通报：数学辑》（已录用）。https://www.mathnet.ru/eng/im9372 （arXiv版本：arXiv:2204.13671 [quant-ph]（2022年）。 https://doi.org/10.48550/arXiv.2204.13671）[22] Li, B., Yu, Z., Fei, S., Li-Jost, X.：双量子比特系统的时间最优量子控制。《中国科学：物理学 力学 天文学》56，2116–2121（2013年）。
https://doi.org/10.1007/s11433-013-5325-9[23]Rafiee, M., Nourmandipour, A., Mancini, S.：耗散环境中双量子比特纠缠的最优反馈控制。《物理评论A》94(1)，012310（2016年）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.012310[24] Allen, J.L., Kosut, R., Joo, J., Leek, P., Ginossar, E.：电路量子电动力学中通过单一腔驱动对两个量子比特进行最优控制。《物理评论A》95(4)，042325（2017年）。
https://doi.org/10.1103/PhysRevA.95.042325[25]Hu, J., Ke, Q., Ji, Y.：通过最优Bang-Bang控制引导双量子比特系统的量子动力学。《国际理论物理学杂志》57(5)，1486–1497（2018年）。https://doi.org/10.1007/s10773-018-3676-8[26] Hirose, M., Cappellaro, P.：有限带宽下的时间最优控制。《量子信息处理》17，88（2018年）。 https://doi.org/10.1007/s11128-018-1845-6[27] Feng, G., Cho, F.H., Katiyar, H., Li, J., Lu, D., Baugh, J., Laflamme, R.：固态双量子比特系统中的基于梯度的闭环量子最优控制。《物理评论A》98(5)，052341（2018年）。
https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.052341

[28]Sun, B.-Z., Fei, S.-M., Jing, N., Li-Jost, X.：基于量子门分类的时间最优控制。《量子信息处理》**19**，103（2020年）。https://doi.org/10.1007/s11128-020-2602-1

[29] Morzhin, O.V., Pechen, A.N.：利用相干控制和非相干控制生成两个量子比特的密度矩阵。《罗巴切夫斯基数学杂志》**42**(10), 2401–2412（2021年）。
https://doi.org/10.1134/S1995080221100176

[30] Shindi, O., Yu, Q., Dong, D.：一种用于控制双量子比特系统的改进型深度Q学习算法。2021年IEEE系统、人类与控制论国际会议（SMC）论文集，3454–3459（2021年）。
https://doi.org/10.1109/SMC52423.2021.9658732

[31]Petruhanov, V.N., Pechen, A.N.：通过GRAPE方法对相干控制和非相干控制驱动的双量子比特开放量子系统进行态制备的最优控制。《国际现代物理学杂志B》**37**, 20n21, 2243017（2022年）。https://doi.org/10.1142/S0217751X22430175

[32]Müller, M.M., Reich, D.M., Murphy, M., Yuan, H., Vala, J., Wha- ley, K.B., Calarco, T., Koch, C.P.: 优化物理系统中的纠缠量子门。《物理评论A》**84**(4), 042315（2011年）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.84.042315[33] Wang, Q.L., Ren, H.F., Wang, P.: 自旋链中双量子比特量子信息完美传输控制研究。《印度物理学杂志》**96**(2), 391–397（2022年）。
https://doi.org/10.1007/s12648-020-01949-3[34]Schirmer, S.G., Fu, H., Solomon, A.I.: 量子系统的完全可控性。《物理评论A》**63**(6), 063410（2001年）。
https://doi.org/10.1103/PhysRevA.63.063410[35] Polack, T., Suchowski, H., Tannor, D.J.: 不可控量子系统：基于李子代数的分类方案。《物理评论A》**79**(5), 053403（2009年）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.053403[36] Kuznetsov, S.A., Pechen, A.N.: 关于具有“链式”耦合哈密顿量的高度简并四能级量子系统的可控性。《罗巴切夫斯基数学杂志》**43**:7, 1683–1692（2022年）。
https://doi.org/10.1134/S1995080222100225[37]Myachkova, A.A., Pechen, A.N.: 若干可控和不可控的简并四能级量子系统。斯捷克洛夫数学研究所论文集（已接收）。https://www.mathnet.ru/eng/tm4321[38] Bochkin, G.A., Fel’dman, E.B., Lazarev, I.D., Pechen, A.N., Zenchuk, A.I.: 零阶相干矩阵沿自旋1/2链的传递。量子信息处理 **21**, 261（2022年）。 https://doi.org/10.1007/s11128-022-03613-7[39] Ai, Q., Fan, Y.-J., Jin, B.-Y., Cheng, Y.-C.: 激光场影响下光合系统相干能量传递动力学的高效量子跳跃方法。《新物理学杂志》**16**, 053033（2014年）。
https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/5/053033

[40]Boscain, U., Sigalotti, M., Sugny, D.: 量子最优控制中庞特里亚金极大值原理简介。PRX Quantum 2(3), 030203（2021年）。https://doi.org/10.1103/PRXQuantum.2.030203

[41]Buldaev, A., Kazmin, I.：量子系统优化问题中极大值原理的算子方法. Mathematics 10(3), 507 (2022年).https://doi.org/10.3390/math10030507

[42]Schulte-Herbrüggen, T., Glaser, S.J., Dirr, G., Helmke, U.：量子信息与量子动力学优化的梯度流：基础与应用. Rev. Math. Phys. 22(6), 597–667 (2010年). https://doi.org/10.1142/S0129055X10004053

[43] Gough, J., Belavkin, V.P., Smolyanov, O.G.：量子最优反馈控制的哈密顿–雅可比–贝尔曼方程. J. Opt. B Quantum Semiclass. Opt.7(10), S237 (2005年). https://doi.org/10.1088/1464-4266/7/10/006.

[44] Krotov, V.F.：《最优控制理论中的全局方法》。纽约：Marcel Dekker（1996年）

[45]Morzhin, O.V., Pechen, A.N.：封闭量子系统最优控制的 Krotov方法。《俄语数学调查》74(5), 851–908（2019年）。https://doi.org/10.1070/RM9835

[46] Song, X.-K., Ai, Q., Qiu, J., Deng, F.-G.：利用多重薛定谔动力学实现物理可行的三能级无跃迁量子驱动。《物理评论A》93，052324（2016年）。 https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.052324[47]Pechen, A., Prokhorenko, D., Wu, R., Rabitz, H.：两能级开放量子系统的控制景观。《物理学杂志A》41，045205（2008年）。https://doi.org/10.1088/1751-8113/41/4/045205[48]Oza, A., Pechen, A., Dominy, J., Beltrani, V., Moore, K., Rabitz, H.：具有Kraus映射演化的开放量子系统控制景观上的优化搜索工作量。《物理学杂志A》42，205305（2009年）。https://doi.org/10.1088/1751-8113/42/20/205305[49] Dann, R., Tobalina, A., Kosloff, R.：快速实现平衡化。《物理评论A》101（5），052102（2020年）。 https://doi.org/10.1103/PhysRevA.101.052102[50] Pechen, A., Rabitz, H.：教会环境控制量子系统。《物理评论A》73（6），062102（2006年）。 https://doi.org/10.1103/PhysRevA.73.062102[51] Pechen, A.：任意纯量子态和混合量子态的制备。《物理评论A》84（4），042106（2011年）。 https://doi.org/10.1103/PhysRevA.84.042106[52]Pechen, A., Il'in, N., Shuang, F., Rabitz, H.：通过冯·诺伊曼测量实现量子控制。《物理评论A》74（5），052102（2006年）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.052102

[53]Shuang, F., Pechen, A., Ho, T.-S., Rabitz, H.: 观察辅助的量子动力学最优控制。《化学物理学杂志》**126**（13），134303（2007年）。https://doi.org/10.1063/1.2711806

[54]Shuang, F., Zhou, M., Pechen, A., Wu, R., Shir, O.M., Rabitz, H：通过优化测量控制量子动力学。《物理评论A》**78**(6), 063422（2008年）。
https://doi.org/10.1103/PhysRevA.78.063422

[55]Higgins, K.D.B., Benjamin, S.C., Stace, T.M., Milburn, G.J., Lovett, B.W., Gauger, E.M.: 通过量子工程实现光的超吸收。《自然·通讯》**5**, 4705（2014年）。
https://doi.org/10.1038/ncomms5705

[56]Hwang, B., Goan, H.-S.: 非马尔可夫开放量子系统的最优控制。《物理评论A》**85**(3), 032321（2012年）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.85.032321

[57] Mukherjee, V., Giovannetti, V., Fazio,R., Huelga, S.F., Calarco, T., Montangero, S.: 量子控制的非马尔可夫热化的效率。《新物理学杂志》 **17**, 063031 (2015年).
https://doi.org/10.1088/1367-2630/17/6/063031

[58]Lucas, F., Hornberger, K.: 马尔可夫量子动力学的自适应重求和。《物理评论快报》**110**(24), 240401 (2013 年).https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.240401

[59]Linington, I.E., Garraway, B.M.: 振荡模结构腔量子电动力学中的耗散控制。《物理评论A》 **77**(3), 033831 (2008年).https://doi.org/10.1103/PhysRevA.77.033831

[60]Zhong, H., Hai, W., Lu, G., Li, Z.: 非厄米玻色–哈伯德二聚体中的非相干控制。《物理评论A》**84**(1), 013410 (2011年).
https://doi.org/10.1103/PhysRevA.84.013410[61] Singh, K.P., Rost, J.M.: 噪声作用下原子的飞秒光电离。《物理评论A》**76**(6), 063403 (2007年).
https://doi.org/10.1103/PhysRevA.76.063403[62] Mukhopadhyay, C.: 利用自旋热浴，通过自主热力学机器产生稳态量子相干性和魔性。《物理评论A》**98**(1), 012102 (2018年). https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.012102[63]Rossini, D., Calarco, T., Giovannetti, V., Montangero, S., Fazio, R.: 工程化量子热浴导致的退相干。《物理学杂志A》**40**(28), 8033–8040 (2007年).
https://doi.org/10.1088/1751-8113/40/28/S12[64]Qutubuddin, Md., Dorfman, K.E.: 光信号的非相干控制：量子热机方法。《物理评论研究》**3**(2), 023029 (2021年).
https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.3.023029[65] Facchi, P., Tasaki, S., Pascazio, S., Nakazato, H., Tokuse, A., Lidar, D.A.: 退相干控制：三种不同策略的分析与比较。《物理评论A》。**71**(2), 022302 (2005年).
https://doi.org/10.1103/PhysRevA.71.022302.

[66] Laforge, F.O., Kirschner, M.S., Rabitz, H.A.：用于动力学控制的整形非相干光：荧光粉上转换色调的优化。《化学物理学杂志》**149**, 054201 (2018年).
https://doi.org/10.1063/1.5035077

[67]Pechen, A.N., Trushechkin, A.S.：测量辅助的 Landau–Zener 跃迁。《物理评论A》**91**(5), 052316（2015年）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.91.052316

[68]Mohseni, M., Rebentrost, P., Lloyd, S., Aspuru-Guzik. 光合能量传递中的环境辅助量子行走。《化学物理学杂志》**129**(17), 174106（2008年）。 https://doi.org/10.1063/1.3002335。

[69]Lokutsievskiy, L., Pechen, A.：相干控制和非相干控制下双能级开放量子系统的可达集。《物理学杂志A》**54**(39), 395304（2021年）。https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac19f8

[70]Morzhin, O.V., Pechen, A.N.：相干控制与非相干控制下双能级开放量子系统密度矩阵重叠度的极大化。《罗巴切夫斯基数学杂志》**40**(10), 1532–1548 (2019年).
https://doi.org/10.1134/S1995080219100202

[71] Morzhin, O.V., Pechen, A.N.：相干控制与非相干控制下开放双能级量子系统 Uhlmann–Jozsa 保真度的极大化。《物理学与原子核》**51**(4), 464–469 (2020年).
https://doi.org/10.1134/S1063779620040516

[72]Morzhin, O.V., Pechen, A.N.：双能级量子系统相干控制与非相干控制的优化。《俄罗斯科学院通报：数学辑》（已接受）（arXiv 版本：arXiv:2205.02521 [量子物理] (2022年).https://doi.org/10.48550/arXiv.2205.02521)[73]Levitin, E.S., Polyak, B.T.：约束极小化方法。《苏联计算数学与数学物理》**6**(5), 1–50 (1966年).
https://doi.org/10.1016/0041-5553(66)90114-5[74] Demyanov, V.F., Rubinov, A.M.：《优化问题的近似方法》／俄语译本。美国爱思唯尔出版公司，纽约（1970年）
[75] Polyak, B.T.：《优化导论》／俄语译本。Optimization Software公司出版部，纽约（1987年）[76]Polyak, B.T.：加快迭代方法收敛的一些方法。《苏联计算数学与数学物理》**4**(5), 1–17 (1964年).https://doi.org/10.1016/0041-5553(64)90137-5
[77] Antipin, A.S.：利用微分方程在凸集上极小化凸函数。《微分方程》**30**(9), 1365–1375 (1994年)</style}

[78]Heuts, Y.J.J., Padilla, G.P., Donkers, M.C.F.：用于求解受约束线性二次最优控制问题的自适应重启重球投影原始-对偶方法。第60届IEEE CDC会议论文集，6722–6727页（2021年）。https://doi.org/10.1109/CDC45484.2021.9683013

[79]Zhang, F.：《矩阵理论：基本结果与方法》。第二版。施普林格，纽约、多德雷赫特、海德堡、伦敦（2011年）。https://doi.org/10.1007/978-1-4614-1099-7[80]《非光滑优化及其应用》/ S. Hos- seini、B.S. Mordukhovich、A. Uschmajew 编。比克豪泽（2019年）。https://doi.org/10.1007/978-3-030-11370-4[81] Morzhin, O.V.：最优控制问题中非光滑惩罚泛函次微分的近似。《自动化与远程控制》70(5)，761–771页（2009年）。https://doi.org/10.1134/S0005117909050051[82] Mendonça, P.E.M.F., Napolitano, R.d.J., Marchiolli, M.A., Foster, C.J., Liang, Y.-C.：量子态之间的另一种保真度度量。《物理评论A》78，052330（2008年）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.78.052330[83]Holevo, A.S.：《量子系统、信道与信息：数学导论》。第二版。德古意特，柏林、波士顿（2019年）。https://doi.org/10.1515/9783110642490[84] Wilde, M.M.：《量子信息论》。第二版。剑桥大学出版社，剑桥（2017年）。[85]Pontryagin, L.S., Boltyanskii, V.G., Gamkrelidze, R.V., Mishchenko, E.F.：《最优过程的数学理论》/ 俄语译本。Interscience Publishers 约翰·威立父子公司，纽约–伦敦（1962年）。[86] Gabasov, R., Kirillova, F.M.：《奇异最优控制》/ 俄语译本。普林努姆出版社，纽约（1978年）