



رهیافت مبتنی بر روش وردشی برای کنترل کلی دینامیک‌های کوانتومی

وحید رضوانی^۱ و علی رضاخانی^{۱*}

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

۲. دانشکده مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد هشتگرد، البرز

پست الکترونیکی: rezakhani@sharif.edu

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۱۰/۲۳؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۱/۳/۱۲)

چکیده

کنترل دینامیک‌های کوانتومی با مانستگي بالا و در حضور نوفه‌های محیطی از الزامات فناوری کوانتومی است. به این منظور، ما در این مقاله رهیافتی را مبتنی بر روش وردشی معرفی می‌کنیم که کاملاً براساس دینامیک (ماتریس فرایند) یک سامانه باز کوانتومی و مستقل از هر حالت اولیه سامانه است. در اینجا با کمک روش پرکاربرد وردشی مجموعه‌ای از معادله‌های بهینه‌سازی را برای یک مسئله کلی کنترل دینامیکی یک سامانه باز کوانتومی به دست می‌آوریم که منجر به معرفی یک ثابت حرکت در فضای پارامترهای بهینه‌سازی می‌شود. معادله‌های بهینه‌سازی را با استفاده از یک روش عددی تکرار برای مسئله خاص و مهم شبیه‌سازی دینامیک کوانتومی در یک زمان از پیش تعیین شده حل می‌کنیم.

واژه‌های کلیدی: سامانه باز کوانتومی، کنترل دینامیکی، ماتریس فرایند، روش وردشی

۱. مقدمه

یکی از ملزومات فناوری کوانتومی، کنترل دینامیک‌های کوانتومی است؛ از شبیه‌سازی دروازه‌های کوانتومی برای رایانش کوانتومی [۱ و ۲] گرفته تا مهندسی محیط برای ساخت یک حالت دلخواه [۳ و ۴]. به عبارت دیگر می‌خواهیم دینامیک‌های کوانتومی را در حضور نوفه‌های مخرب محیطی به منظور نیل به یک هدف دلخواه کنترل کنیم. این نوفه‌ها می‌توانند منجر به کاهش عملکرد سامانه در رسیدن به این هدف شوند. هرچند گاهی ممکن است این نوفه‌ها سودمند واقع شوند؛ مانند افزایش بازدهی انتقال

انرژی [۵] یا حتی ایجاد درهم‌تنیدگی بین دو زیرسامانه جدا

از یکدیگر [۶].

در سالیان اخیر روش‌های متعددی برای حفظ یک سامانه از آثار مخرب محیط [۷-۱۰] برای اهداف دلخواه از جمله شبیه‌سازی‌های کوانتومی توسعه داده شده‌اند. یکی از این روش‌های قدرتمند، نظریه کنترل بهینه [۱۱-۱۴] است که کاربردهای زیادی در دنیای کوانتومی پیدا کرده است؛ مانند آماده‌سازی حالت‌های کوانتومی [۱۵] یا ساخت موتورهای گرمایی کوانتومی پر قدرت [۱۶]. همچنین از این نظریه برای شبیه‌سازی دینامیک‌های کوانتومی در یک زمان از پیش تعیین شده بهره گرفته شده است که

دینامیکی را مطرح می‌کنیم که بر پایه ماتریس فرایند بیان می‌شود. پس از آن در بخش سوم به استخراج شرایط لازم برای جواب بهینه مسئله بر پایه روش وردشی می‌پردازیم و نشان خواهیم داد که یک تابع با نام شبه‌هایمیلتونی به ازای جواب بهینه، یک ثابت حرکت خواهد بود. در بخش چهارم تنها برای نمایش سودمند بودن رهیافت مبتنی بر روش وردشی، این شرایط را برای مسئله خاص شبیه‌سازی دینامیک در یک زمان مشخص نوشته و آنها را با استفاده از یک روش عددی تکرار حل می‌کنیم. در بخش آخر، این رهیافت را برای مسائل مهمی همچون شبیه‌سازی یک دروازه کوانتومی در حضور نوفه‌های محیطی، کاهش وادوسی و نیز مهندسی غیرمستقیم محیط از طریق اعمال یک میدان مناسب به سامانه به کار خواهیم برد.

۲. کنترل بهینه دینامیک‌های کوانتومی: شکل کلی

مسئله

سامانه کوانتومی S را با بعد فضای هیلبرت N و هایمیلتونی آزاد h_S در نظر بگیرید که در مجاورت یک محیط با هایمیلتونی آزاد h_B قرار دارد. این سامانه از طریق هایمیلتونی $h_{SB} = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \otimes B_{\alpha}$ با محیط خود برهم‌کنش دارد که در آن a_{α} و B_{α} (به ترتیب) عملگرهای هرmitesی متعلق به فضای عملگری سامانه و محیط هستند. سامانه S توسط میدان‌های خارجی وابسته به زمان $\mathcal{E}(t) = \{\varepsilon_m(t)\}$ تحریک می‌شود. در نتیجه هایمیلتونی سامانه کل (سامانه S و محیط) به صورت $h(t) = h_S(t) + h_B + h_{SB}$ خواهد بود که در آن $h_S(t) = h_S + \sum_m \varepsilon_m(t) V_m$ و V_m ها عملگرهای هرmitesی مستقل از زمان متعلق به فضای عملگری سامانه S هستند. مطابق با نظریه کنترل بهینه [۱۱]، میزان اثربخشی میدان‌های $\varepsilon_m(t)$ را در رسیدن به یک هدف مشخص از طریق تابعی هدف کل زیر مورد ارزیابی قرار می‌دهیم:

$$J = F(\chi(t_f), t_f) + \int_0^{t_f} dt G(\chi(t), \mathcal{E}(t), t), \quad (1)$$

که در آن ماتریس $N^2 -$ بعدی $\chi(t)$ با نام ماتریس فرایند [۱۹]، دینامیک یک سامانه کوانتومی (باز یا بسته) را به طور کامل

در آنها عمدتاً مانستگي یک دینامیک دلخواه با یک دینامیک متوسط پیشینه می‌شود [۲، ۱۷ و ۱۸]. این دینامیک آخری از اثر متوسط یک نگاشت کوانتومی [۱۹] (یک نگاشت کاملاً مثبت و ردنگهدار) بر روی برخی حالت‌های کوانتومی به دست می‌آید. با این وجود در مرجع [۲۰] روشی برای شبیه‌سازی دینامیک‌های کوانتومی ارائه می‌شود که مبتنی بر یک ماتریس مثبت-نیمه‌معین با نام ماتریس فرایند [۱۹] است که تمامی ویژگی‌های یک نگاشت کوانتومی را در بر دارد. بنابراین این روش یک راه مستقیم‌تری نسبت به کارهای گذشته برای کنترل دینامیک‌های کوانتومی در اختیار ما قرار می‌دهد. در آنجا از یک الگوریتم یکنوا همگرا تحت عنوان کراتوف [۲۱-۲۳] برای حل مسئله مهم شبیه‌سازی دینامیک‌های کوانتومی بهره گرفته می‌شود که قابل تعمیم به موارد کلی‌تر کنترل دینامیکی یک سامانه کوانتومی است. در اینجا ما با کمک یک روش محبوب‌تر و پرکاربردتر در حوزه بهینه‌سازی یعنی روش وردشی [۱۱] یک فرمول‌بندی کلی برای مسئله کنترل دینامیکی ارائه می‌کنیم که منجر به یک سری معادله‌های بهینه‌سازی می‌شود. ما تمامی این معادله‌ها را برحسب یک تابع نرده‌ای با نام شبه‌هایمیلتونی بیان می‌کنیم. در اینجا نشان خواهیم داد که این تابع به ازای جواب بهینه مسئله، یک ثابت حرکت است که این به نوبه خود یکی از مزیت‌های استفاده از روش وردشی نسبت به دیگر روش‌ها را آشکار می‌کند. علاوه بر این استفاده از روش وردشی این امکان را به وجود می‌آورد که بتوانیم از الگوریتم‌های احیاناً سریع‌تر و دقیق‌تر نسبت به الگوریتم کراتوف مانند الگوریتم ژور-بیتز [۲۴ و ۲۵] برای حل این معادله‌ها استفاده کنیم. با این وجود ما در این کار از چنین الگوریتم‌هایی بهره نگیریم و یک الگوریتم عددی تکرار را برای حل مسئله خاص کنترل دینامیک نهائی یک سامانه باز کوانتومی معرفی می‌کنیم. با وجود این که الگوریتم پیشنهادی یک الگوریتم یکنوای همگرا محسوب نمی‌شود، اما قابلیت تعمیم به طیف وسیعی از مسائل بهینه‌سازی دینامیک کوانتومی را دارد.

در این مقاله ابتدا در بخش دوم شکل کلی مسئله بهینه‌سازی

۱. Fidelity

۲. Completely positive and trace preserving map

می‌آید. این معادلهٔ مادر به شکل

$$\begin{aligned} \frac{d\chi(t)}{dt} = K_{\mathcal{E}}(\chi(t)) = & -\frac{i}{\hbar} [H_S(t) + H_{Lamb}, \chi(t)] \\ & + \sum_{\xi, \nu} \sum_{\omega} (A_{\nu}(\omega) \chi(t) A_{\xi}^{\dagger}(\omega) \\ & - \frac{1}{\nu} \{A_{\xi}^{\dagger}(\omega) A_{\nu}(\omega), \chi(t)\}), \end{aligned} \quad (3)$$

است که در آن ابرعملگر وابسته به میدان $K_{\mathcal{E}}$ دینامیک ماتریس فرایند $\chi(t)$ را به طور کامل توصیف می‌کند و

عملگر $X = \{H_S(t), H_{Lamb}, A_{\nu}(\omega)\}$ به صورت

$$[X]_{\alpha\beta} = \text{Tr}[C_{\alpha}^{\dagger} X C_{\beta}]$$

تعریف $\alpha, \beta = \{1, \dots, N\}$ و $x = \{h_S(t), h_{Lamb}, a_{\nu}(\omega)\}$

می‌شود. توجه داشته باشید که عملگرهای $a_{\nu}(\omega)$ به صورت

$$a_{\nu}(\omega) = \sum_{E'-E=\omega} |E\rangle \langle E| a_{\nu} |E'\rangle \langle E'|$$

به صورت $h_S |E\rangle = E |E\rangle$ و ضرایب $\gamma_{\xi\nu}(\omega)$ به صورت

$$\gamma_{\xi\nu}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{i\omega s} \text{Tr}[B_{\xi}^{\dagger}(s) B_{\nu}(\circ) \rho_B]$$

تعریف می‌شوند. هامیلتونی $B_{\xi}(s) = e^{\frac{i}{\hbar} h_B s} B_{\xi} e^{-\frac{i}{\hbar} h_B s}$

جابه‌جایی لمب $h_{Lamb} = \sum_{\xi, \nu} \sum_{\omega} S_{\xi\nu}(\omega) a_{\xi}^{\dagger}(\omega) a_{\nu}(\omega)$

$$S_{\xi\nu}(\omega) = (1/\nu i) [\Gamma_{\xi\nu}(\omega) - \Gamma_{\nu\xi}^*(\omega)]$$

تصحیح ناشی $(\Gamma_{\xi\nu}(\omega) = \int_{\circ}^{\infty} ds e^{i\omega s} \text{Tr}[B_{\xi}^{\dagger}(s) B_{\nu}(\circ) \rho_B])$

از محیط بر روی هامیلتونی آزاد سامانه را نشان می‌دهد.

شرط مرزی این معادله به صورت

$$\chi_{\alpha\beta}(\circ) = N \delta_{\alpha N} \delta_{\beta N}$$

است. براساس معادلهٔ مادر (۳)، میدان‌های خارجی تنها به

طور همدوس دینامیک سامانه را دستکاری می‌کنند و تحول

اتلافی سامانه (جملهٔ دوم) توسط این میدان‌ها بدون تغییر

باقی می‌ماند.

صورت کلی مسئلهٔ کنترل بهینهٔ دینامیک یک سامانهٔ باز

به این گونه خواهد بود: می‌خواهیم میدان‌های کنترلی $\{\mathcal{E}_m(t)\}$

را به گونه‌ای بیابیم که تابعی هدف (۱) بیشینه شود و دینامیک

سامانه $(\chi(t))$ مطابق با معادلهٔ مادر (۳) تحول یابد. در ادامه،

ابتدا شرایط لازم را برای این میدان‌های کنترلی بهینه بیان

می‌کنیم و سپس به حل عددی معادله‌های بهینه‌سازی حاصل از

توصیف می‌کند. به عبارت دیگر این ماتریس مثبت-نیمه‌معیین

تمامی ویژگی‌های نگاشت ردنگهدار و کاملاً مثبت $E_{(s,t)}$ را در

بردارد و یک یک‌ریختی (با شرط عدم همبستگی بین سامانه و

محیط در لحظهٔ اول $(t = \circ)$ به صورت

$$\rho_S(t) = E_{(s,t)}(\rho_S(\circ)) = \sum_{\lambda, \mu=1}^{N^2} \chi_{\lambda\mu}(t) C_{\lambda} \rho_S(\circ) C_{\mu}^{\dagger},$$

$$\begin{aligned} \chi_{\lambda\mu}(t) = & \sum_{\sigma, \nu} r_{\nu} \text{Tr}[\langle b_{\sigma} | U(t) | b_{\nu} \rangle C_{\lambda}^{\dagger}] \\ & \times \text{Tr}[\langle b_{\sigma} | U(t) | b_{\nu} \rangle C_{\mu}^{\dagger}]^* \end{aligned} \quad (2)$$

بین آنها وجود دارد که در آن $\rho_S(t)$ حالت سامانه در لحظهٔ

دلخواه $t > \circ$ را نشان می‌دهد و عملگر یکانی $U(t)$ توسط

هامیلتونی کل $h(t)$ تولید می‌شود. همچنین $\{r_{\nu}; |b_{\nu}\rangle\}$ مجموعهٔ

ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای حالت اولیهٔ محیط (ρ_B) است

($\sum_{\nu} r_{\nu} = 1$) و C_{λ} ها پایه‌های عملگری سامانه را تشکیل

می‌دهند که $\text{Tr}[C_{\lambda} C_{\mu}^{\dagger}] = \delta_{\lambda\mu}$ و $C_{N^2} = (1/\sqrt{N}) I_S$ در

رابطهٔ (۱) تابع نرده‌ای F تنها به زمان نهایی تحول سامانه (t_f)

و همچنین دینامیک نهائی $\chi(t_f)$ وابسته است و شامل تمامی

قیدهای روی این دینامیک خواهد بود. به‌عنوان مثال این تابع

می‌تواند بیانگر میزان مانستگی دینامیک $\chi(t_f)$ به یک دینامیک

دلخواه در زمان نهائی t_f باشد. تابع زمان میانی G به تمامی

زمان‌های $\circ \leq t < t_f$ وابسته است که شامل تمامی قیدها بر روی

دینامیک سامانه $(\chi(t))$ و میدان‌های کنترلی $(\mathcal{E}(t))$ در این

زمان‌ها است. به عنوان نمونه‌ای از این تابع می‌توان به قید

انرژی میدان‌های اعمال‌شده یا مانستگی دینامیک سامانه در

تمامی زمان‌ها یعنی $\chi(t)$ ($\circ \leq t < t_f$)، با یک دینامیک دلخواه

اشاره کرد. مثال‌هایی از تابع‌های F و G در بخش چهارم

معرفی خواهند شد.

علاوه بر تابعی هدف، یکی دیگر از ملزومات کنترل بهینهٔ

دینامیک کوانتومی معادلهٔ مادری است که تحول زمانی دینامیک

(ماتریس فرایند) سامانه را توصیف می‌کند. این معادله برای

تحول مارکوفی در مرجع [۲۰] استخراج شده است که مبتنی بر

شرط بخش‌پذیری در مرجع $E_{(0,t)} = E_{(0,s)} E_{(s,t)}$ برای $\circ \leq s \leq t$ است.

این معادلهٔ مادر را می‌توان براساس روش میکروسکوپی [۲۶] و

[۲۷] نیز به دست آورد که جزئیات استخراج آن در پیوست الف

آنها می‌پردازیم.

۳. معادله‌های بهینه‌سازی دینامیک بر مبنای روش

وردشی: معرفی ثابت حرکت بهینه‌سازی

برای حل مسئله کنترل ذکرشده در بخش قبل می‌توان از الگوریتم‌های تکرار استفاده کرد. یکی از این الگوریتم‌ها، الگوریتم کراتوف [۲۱-۲۳] است که یک الگوریتم یکنوای همگرا محسوب می‌شود و با هر تکرار به جواب بهینه نزدیک‌تر می‌شود، یعنی $J^{(n)} \leq J^{(n-1)}$ که در آن $n=1,2,\dots$ عدد تکرار را نشان می‌دهد و تابعی J یک تابعی هدف وابسته به میدان‌های کنترلی و حالت (دینامیک) است؛ مانند تابعی (۱). برای طراحی این الگوریتم کافی است که تابعی هدف و معادله مادر را در اختیار داشته باشیم. این الگوریتم در شکل اولیه خود [۲۳] برای کنترل حالت یک سامانه ارائه شده که در مرجع [۲۰] برای مسئله خاص شبیه‌سازی یک دینامیک دلخواه در یک زمان مشخص تعمیم داده شده است و قابلیت تعمیم به مسائل کلی‌تر بهینه‌سازی دینامیک را نیز دارد. معادله‌های بهینه‌سازی در ذات این الگوریتم وجود دارند و نیازی به استفاده از روش‌های دیگر همچون روش وردشی برای به دست آوردن آنها نیست. با این وجود برای حل مسئله کلی کنترل دینامیکی، ما از روش مبتنی بر وردش بهره می‌گیریم که نهایتاً منجر به یک مجموعه معادله‌های بهینه‌سازی کلی می‌شود. این معادله‌ها برای هرگونه کنترل دینامیکی با هر هدف دلخواهی از جمله شبیه‌سازی دینامیکی برقرار است. برای حل آنها می‌توان از یک الگوریتم غیریکنوای همگرا یا یکنوای همگرا مانند الگوریتم ژو-ریبتز [۲۴] استفاده کرد. درگونه تعمیم‌یافته الگوریتم ژو-ریبتز [۲۵] پارامترهایی تحت عنوان پارامترهای همگرایی وجود دارند که با کمک آنها می‌توان سرعت و دقت الگوریتم را تنظیم کرد. با تنظیم مناسب این پارامترها می‌توان دقت و سرعت همگرایی را نسبت به الگوریتم کراتوف افزایش داد. با این وجود این الگوریتم برای تابعی‌های هدف نامحدب (همانند آنچه در بخش ۴ معرفی می‌شود) تعمیم داده نشده است [۲۵]. در ادامه، ابتدا با

کمک روش وردشی مجموعه‌ای از معادله‌های بهینه‌سازی را برای مسئله کلی شرح داده شده در بخش قبل به دست می‌آوریم. سپس در بخش بعدی به عنوان یک مثال، بر روی مسئله اساسی و مهم کنترل دینامیک یک سامانه باز در زمان نهائی تمرکز می‌کنیم و معادله‌های بهینه‌سازی را برای آن می‌نویسیم. از آنجائی که تابعی هدف معرفی شده برای این مسئله، یک تابعی نامحدب نسبت به دینامیک است، بنابراین برای حل این معادله‌ها به جای الگوریتم ژو-ریبتز از یک الگوریتم عددی تکرار استفاده می‌کنیم که لزوماً به‌طور یکنوا به جواب بهینه نزدیک نمی‌شود. تعمیم این الگوریتم به مسائل کلی‌تر کنترل دینامیکی سراسر است.

روش وردشی برای حل مسئله ذکرشده در بخش قبلی با جزئیات در پیوست ب می‌آید. در اینجا تنها نتایج این پیوست را بیان می‌کنیم. معادله‌های بهینه‌سازی که نشان‌دهنده شرایط لازم جواب مسئله کنترل بهینه دینامیک هستند را می‌توان برحسب تابع نرده‌ای زیر با نام شبه‌هامیلتونی بیان کرد:

$$H(\chi, \Lambda, \varepsilon, t) = G(\chi, \varepsilon, t) + \text{Tr}[\Lambda K_{\varepsilon}(\chi)], \quad (4)$$

از این به بعد برای سادگی در نمایش، وابستگی صریح کمیت‌ها به زمان را حذف می‌کنیم. عملگر هرمیتی $\Lambda = \Lambda(t)$ با عنوان مضرب لاگرانژ واسطه‌ای است که به کمک آن معادله مادر (۳) به عنوان قید دینامیکی وارد تابعی هدف (۱) می‌شود. این باعث می‌شود که دینامیک χ و میدان‌های $\{\varepsilon_m(t)\}$ به عنوان متغیرهای مستقل مسئله در نظر گرفته شوند. شرایط لازم برای میدان‌های بهینه $\{\hat{\varepsilon}_m(t)\}$ برحسب این شبه‌هامیلتونی به صورت

$$\frac{d\hat{\chi}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \Lambda^T}, \quad \frac{d\hat{\Lambda}}{dt} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \chi^T}, \quad \frac{\partial \hat{H}}{\partial \varepsilon_m} = 0, \quad (5)$$

برای $t \in [0, t_f]$ خواهند بود که در آن $\hat{H} \equiv H(\hat{\chi}, \hat{\Lambda}, \hat{\varepsilon}, t)$ شبه‌هامیلتونی H به ازای مقادیرهای بهینه متغیرها است. در روابط بالا مشتق جزئی کمیت نرده‌ای \hat{H} نسبت به یک ماتریس N^2 - بعدی Y به صورت $(\partial \hat{H} / \partial Y^T)_{ij} = \partial \hat{H} / \partial Y_{ji}$ تعریف می‌شود (T ترانپوز را نشان می‌دهد). علاوه بر این، شرط

مرزی زیر باید در لحظه نهایی $t = t_f$ برقرار باشد:

$$\left(\frac{\partial F_f}{\partial t} + H_f \right) \delta t_f + \text{Tr} \left[\left(\frac{\partial F_f}{\partial \chi^T} - \hat{\Lambda}(t_f) \right) \delta \chi_f \right] = 0, \quad (6)$$

$$\hat{F}_f \equiv F(\hat{\chi}(t_f), t_f) \quad \text{آن در که}$$

$$\hat{H}_f \equiv H(\hat{\chi}(t_f), \hat{\Lambda}(t_f), \hat{\varepsilon}(t_f), t_f)$$

نشان می‌دهد. در صورتی که زمان نهایی ثابت باشد آنگاه باید در شرط مرزی بالا، $\delta t_f = 0$ را در نظر بگیریم. توجه داشته باشید که شبه‌هایمیتونی H نقشی مشابه با هایمیتونی در مکانیک کلاسیک را ایفا می‌کند و کمیت‌های χ و Λ به ترتیب همانند مکان و تکانه تعمیم‌یافته عمل می‌کنند. بنابراین دو معادله نخست از مجموعه معادله‌های (۵)، مشابه معادله‌های دینامیکی برای مکان و تکانه تعمیم‌یافته در دنیای کلاسیکی هستند که برحسب هایمیتونی یک سامانه بیان می‌شوند. از روی مجموعه روابط (۵) به راحتی می‌توان ثابت کرد که اگر شبه‌هایمیتونی وابستگی صریحی به زمان نداشته باشد یعنی $H(\chi, \Lambda, \varepsilon)$ ، آنگاه این شبه‌هایمیتونی بر روی مسیر بهینه $(\hat{\chi}, \hat{\Lambda}, \hat{\varepsilon}, t)$ ، یک ثابت حرکت خواهد بود؛ درست همانند یک سامانه بسته کلاسیکی که انرژی یک ثابت حرکت در فضای متشکل از مکان و تکانه تعمیم‌یافته محسوب می‌شود. از آنجائی که تابعی هدف (۱) هر گونه هدف کنترل دینامیکی را بیان می‌کند، بنابراین معادله‌های بهینه‌سازی (۵) و (۶) برای هر مسئله بهینه‌سازی دینامیکی از جمله شبیه‌سازی دینامیکی در یک زمان مشخص مناسب هستند.

۴. حل عددی معادله‌های بهینه‌سازی: روش تکرار

مجموعه معادله‌های بهینه‌سازی (۵) و (۶) برای طیف وسیعی از مسائل کنترل دینامیکی قابل کاربرد هستند. در اینجا تنها برای نشان دادن سودمندی روش ارائه‌شده، ما بر روی یک مسئله خاص و مهم یعنی کنترل دینامیک یک سامانه باز در زمان نهایی ثابت t_f تمرکز می‌کنیم یعنی $\delta t_f = 0$. به عبارت دیگر می‌خواهیم میدان‌های بهینه را به گونه‌ای بیابیم که تابعی هدف

(۱) با تابع زمان نهایی F و تابع زمان میانی G به صورت

$$F(\chi(t_f), t_f) = \frac{\text{Tr}[\chi(t_f)\Xi_f]}{\sqrt{\text{Tr}[\chi^\top(t_f)]\text{Tr}[\Xi_f^\top]}}, \quad (7)$$

$$G(\varepsilon(t), t) = -\sum_m \lambda_m \frac{(\varepsilon_m(t) - \varepsilon_m^{(\text{ref})}(t))^2}{f_m(t)},$$

بیشینه شود و دینامیک سامانه مطابق با معادله مادر (۳) تحول یابد. تابع زمان نهایی F برای اولین بار در مرجع [۲۰] معرفی شده و مانستگی دینامیک نهایی $\chi(t_f)$ را با دینامیک دلخواه Ξ_f نشان می‌دهد، که یک تابع نامحدب نسبت به $\chi(t_f)$ است. از نامساوی کوشی-شوارتز [۱۹] می‌توان نتیجه گرفت که: $0 \leq F \leq 1$. این تابع به‌طور مستقیم به دینامیک سامانه مرتبط است. این در حالی است که تابع F در کارهای قبلی (تاجائی که ما بررسی کردیم) عموماً براساس اثر نگاهت E بر روی برخی حالت‌های خاص (خالص یا مخلوط) تعریف می‌شود و طبیعتی متوسط‌گونه دارد [۲، ۱۷ و ۱۸]. علاوه بر این، این تابع با استفاده از روش‌های توموگرافی فرایند کوانتومی در آزمایشگاه قابل اندازه‌گیری است [۲۸-۳۳]. تابع زمان میانی G تنها به میدان‌های کنترل بستگی دارد که $\varepsilon_m^{(\text{ref})}(t)$ یک میدان مرجع برای میدان کنترل $\varepsilon_m(t)$ است و $\lambda_m \leq 1$ وزن هر جمله را نشان می‌دهد. همچنین $f_m(t)$ تابع شکل میدان نامیده می‌شود که می‌تواند به‌گونه‌ای انتخاب شود که میدان بهینه در زمان‌های اولیه و نهایی خاموش شود. با $\varepsilon_m^{(\text{ref})}(t) = 0$ ، تابع G متناسب با انرژی میدان‌ها خواهد بود. با توجه به رابطه (۴) و مجموعه روابط (۷)، شبه‌هایمیتونی مناسب برای مسئله ذکر شده در بالا به صورت

$$H(\chi, \Lambda, \varepsilon, t) = -\sum_m \lambda_m \frac{(\varepsilon_m(t) - \varepsilon_m^{(\text{ref})}(t))^2}{f_m(t)} + \text{Tr}[\Lambda K_\varepsilon(\chi)], \quad (8)$$

خواهد بود. از روی این شبه‌هایمیتونی و با کمک مجموعه معادله‌های بهینه‌سازی (۵)، می‌توان این معادله‌ها را برای این مسئله خاص به‌صورت زیر به‌دست آورد:

$$\frac{d\hat{\chi}}{dt} = K_\varepsilon(\hat{\chi}), \quad \frac{d\hat{\Lambda}}{dt} = -K_\varepsilon^\#(\hat{\Lambda}), \quad (9)$$

مرزی به دست آمده از گام قبلی برای تعیین $\Lambda^{(n)}(t)$ در تمامی زمان‌های $t \in [0, t_f]$ حل می‌کنیم، که

$$\varepsilon_m^{(n)}(t) = e_m^{(n-1)}(t) + \frac{f_m(t)}{\gamma \lambda_m} \text{Tr} \left[\Lambda^{(n)} \frac{\partial \mathbf{K}_{\varepsilon}^{(n)}(\chi^{(n-1)}(t))}{\partial \varepsilon_m} \right],$$

به دست می‌آیند. بنابراین معادله دینامیکی مضرب لاگرانژ و همچنین معادله اخیر باید به طور هم‌زمان حل شوند.

این الگوریتم را به طور متوالی آن قدر تکرار می‌کنیم تا یک معیار همگرایی مشخص برآورده شود. توجه داشته باشید که برای شروع فرایند بهینه‌سازی باید یک سری میدان‌های اولیه فرضی را در نظر بگیریم. همچنین در گام سوم، میدان‌های به دست آمده در گام قبلی یعنی $\{\varepsilon_m^{(n-1)}(t)\}$ را به عنوان میدان‌های مرجع ($\varepsilon_m^{(ref)}(t)$) در گام پیش‌رو در نظر گرفته‌ایم. در بخش بعدی، این الگوریتم را برای مثال یک کیوبیت تحریک‌شده در محیط وافازی^۱ اعمال خواهیم کرد.

۵. کاربرد: کنترل دینامیک نهایی یک کیوبیت در

محیط وافازی

یک کیوبیت با گاف انرژی ω بین ترازهای انرژی $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ را در نظر بگیرید که توسط میدان خارجی $\varepsilon(t)$ با قدرت جفت‌شدگی μ تحریک می‌شود. این کیوبیت توسط یک محیط وافازی، شامل مدهای نوسانی مستقل از هم با بسامدهای $\{v_k\}$ و عملگرهای فنای $\{d_k\}$ احاطه شده است. در نتیجه هامیلتونی این سامانه کل (سامانه+محیط) از

$$h(t) = \frac{1}{2} \omega \cdot \sigma_z - \mu \cdot \varepsilon(t) \sigma_x + \sum_k v_k d_k^\dagger d_k + \sigma_z \otimes \sum_k (g_k d_k^\dagger + g_k^* d_k),$$

به دست می‌آید. که در آن ماتریس پائولی σ_z به صورت $\sigma_z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$ و $\sigma_x = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|$ تعریف می‌شود و g_k قدرت جفت‌شدگی مد نوسانی k ام با این کیوبیت را نشان

$$\hat{\varepsilon}_m(t) = \varepsilon_m^{(ref)}(t) + \frac{f_m(t)}{\gamma \lambda_m} \text{Tr} \left[\hat{\Lambda} \frac{\partial \mathbf{K}_{\hat{\varepsilon}}(\hat{\chi})}{\partial \varepsilon_m} \right], \quad (10)$$

که $\mathbf{K}_{\hat{\varepsilon}}^\#$ تصویر هایزنبرگ $\mathbf{K}_{\hat{\varepsilon}}$ را نشان می‌دهد. معادله مادر ماتریس فرایند باید تحت شرط مرزی $\chi^{\alpha\beta}(0) = N \delta_{\alpha N} \delta_{\beta N}$ حل شود. همچنین شرط مرزی مربوط به معادله دینامیکی مضرب لاگرانژ $\hat{\Lambda}$ از روی رابطه (۶) و با فرض $\delta t_f = 0$ به صورت زیر به دست خواهد آمد:

$$\hat{\Lambda}(t_f) = \frac{\tilde{\Xi}_f}{\sqrt{\text{Tr}[\hat{\chi}^\dagger(t_f)]}} - \frac{\text{Tr}[\hat{\chi}(t_f) \tilde{\Xi}_f] \hat{\chi}(t_f)}{(\text{Tr}[\hat{\chi}^\dagger(t_f)])^{3/2}}, \quad (11)$$

که در آن $\tilde{\Xi}_f \equiv \Xi_f / \sqrt{\text{Tr}[\Xi_f^\dagger]}$

یکی از الگوریتم‌های تکرار برای حل معادله‌های بهینه‌سازی به دست آمده از روش وردشی الگوریتم یکنوای همگرایی ژو-ریبتر است. با این حال، این الگوریتم برای تابعی‌های هدف نامحدب مانند (۷) تعمیم داده نشده است. به این دلیل برای حل معادله‌های بهینه‌سازی (۹)–(۱۱)، ما از یک الگوریتم تکرار بهره می‌گیریم که لزوماً یک الگوریتم یکنوای همگرا محسوب نمی‌شود و قابل تعمیم به مسائل کلی‌تر بهینه‌سازی دینامیکی است. تکرار (n) ام ($n \in \{1, 2, \dots\}$) این الگوریتم مطابق با سه گام زیر خواهد بود:

۱. با داشتن میدان‌های $\{\varepsilon_m^{(n-1)}(t)\}$ از تکرار $(n-1)$ ام،

معادله مادر $\frac{d\chi^{(n-1)}}{dt} = \mathbf{K}_{\varepsilon^{(n-1)}}(\chi^{(n-1)})$ را برای تمامی زمان‌های $t \in [0, t_f]$ ، با مقدار اولیه $\chi^{\alpha\beta}(0) = N \delta_{\alpha N} \delta_{\beta N}$ حل می‌کنیم.

۲. مضرب لاگرانژ $\Lambda^{(n)}(t_f)$ را با استفاده از رابطه پایین و همچنین دینامیک نهایی $\chi^{(n-1)}(t_f)$ به دست آمده از گام قبلی محاسبه می‌کنیم:

$$\Lambda^{(n)}(t_f) = \frac{\tilde{\Xi}_f}{\sqrt{\text{Tr}[(\chi^{(n-1)}(t_f))^\dagger]}} - \frac{\text{Tr}[\chi^{(n-1)}(t_f) \tilde{\Xi}_f] \chi^{(n-1)}(t_f)}{(\text{Tr}[(\chi^{(n-1)}(t_f))^\dagger])^{3/2}},$$

۳. معادله دینامیکی $\frac{d\Lambda^{(n)}}{dt} = -\mathbf{K}_{\varepsilon^{(n)}}^\#(\Lambda^{(n)})$ را با شرط

۱. Dephasing environment

جدول ۱. تعریف مانستگی‌های بهینه \hat{F} ، میدان-صفر F_0 و مؤثر F_e .

$\hat{F} \equiv F(\hat{\chi}(t_f), \Xi_f)$	t_f ناشی از بهینه‌سازی در زمان نهائی
$F_0 \equiv F(\chi(t_f), \Xi_f)$	مانستگی میدان-صفر: مانستگی میان دینامیک دلخواه Ξ_f و دینامیک $\chi(t_f)$ به دست آمده از معادله (۱۲)
$F_e \equiv F(\hat{\chi}(t_f), \chi(t_f))$	مانستگی مؤثر: مانستگی میان دینامیک $\hat{\chi}(t_f)$ ناشی از بهینه‌سازی در زمان نهائی t_f و دینامیک $\chi(t_f)$ به دست آمده از معادله (۱۲)

دو بخش قبلی که مبتنی بر روش پرکاربرد وردشی است، حل کنیم. در تمامی این سناریوها، میدان اولیه فرضی برای شروع فرایند بهینه‌سازی را به صورت $\varepsilon^{(0)}(t) = f(t)\cos(\omega \cdot t)$ با تابع شکل $f(t) = \sin(\pi t / t_f)$ در نظر می‌گیریم [۱]. پس از اتمام هر فرایند بهینه‌سازی، برای درک بهتر از سودمندی این فرایند، سه مانستگی را معرفی می‌کنیم که در جدول ۱ تعریف شده‌اند. هر چه مقدار مانستگی بهینه \hat{F} بیشتر و مقدار مانستگی مؤثر F_e کوچک‌تر باشد آنگاه فرایند بهینه‌سازی در شبیه‌سازی دینامیک دلخواه کارآمدتر است. این در حالی است که اگر مقدار مانستگی‌های میدان-صفر (F_0) و مؤثر بزرگ‌تر باشد آنگاه بهینه‌سازی در رسیدن به هدف دلخواه چندان کارآمد نبوده است.

الف. کاهش اثرات وادوسی

در این سناریو، قصد داریم میدان کنترلی $\varepsilon(t)$ را به گونه‌ای تعیین کنیم که کیوبیت از محیط پیرامون خود در یک لحظه مشخص جدا شود. به عبارت دیگر، هدف یافتن یک میدان خارجی به گونه‌ای است که کیوبیت غوطه‌ور در محیط بوزونی را وادار به انجام یک تحول یکسانی در زمان t_f کند که هامیلتونی این تحول همان هامیلتونی سامانه یعنی $h_S = (1/2)\omega \cdot \sigma_z$ باشد. با کمک رابطه (۲)، ماتریس فرایند چنین تحول خاصی، برای $\alpha, \beta = \{1, 2, 3, 4\}$ به صورت زیر خواهد بود:

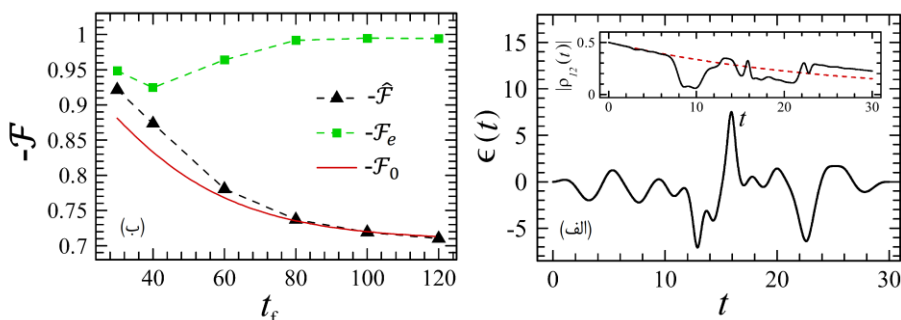
$$\begin{aligned} \left[\Xi_f^{(D)} \right]_{\alpha\beta} &= \gamma \sin(\omega \cdot t_f / 2) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\gamma} \\ &- i \sin(\omega \cdot t_f) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\gamma} + i \sin(\omega \cdot t_f) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\gamma} \\ &+ \gamma \cos(\omega \cdot t_f / 2) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\gamma}, \end{aligned} \quad (13)$$

شکل ۱. الف یکی از میدان‌های بهینه برای زمان نهایی $t_f = 30$

می‌دهد. از اینجا به بعد فرض می‌کنیم که $\hbar = 1$ و تمامی کمیت‌ها را بدون بعد ذکر می‌کنیم. با توجه به مطالب بیان‌شده در بخش دوم، مولد تحول زمانی دینامیک این کیوبیت توسط $K_{\varepsilon}(0) = -i \left[\frac{\omega_0}{2} A_z - \mu_0 \varepsilon(t) A_x, 0 \right] + \gamma_0 (A_z \circ A_z - 0)$ ، داده می‌شود که در آن $[A_i]_{\alpha\beta} = \text{Tr}[C_{\alpha}^{\dagger} \sigma_i C_{\beta}]$ و C_{α} ها ماتریس‌های پائولی بهنجار شده به همراه ماتریس همانی هستند. ضریب لیندبلاد γ_0 توسط $\gamma_0 = \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} j(\omega) (1 + 2n(\omega))$ به تابع چگالی طیفی محیط $j(\omega) = \sum_k |g_k|^2 \delta(\omega - \nu_k)$ و همچنین عدد اشغال آن $n(\omega) = (e^{\omega/k_B T} - 1)^{-1}$ مرتبط می‌شود (T دمای محیط و k_B ثابت بولتزمن است). این معادله مادر با شرط مرزی $\chi_{\alpha\beta}(0) = N \delta_{\alpha N} \delta_{\beta N}$ و همچنین فرض $\varepsilon(t) = 0$ ، یک جواب دقیق به صورت زیر دارد:

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta}(t) &= (1 - e^{-\gamma t} \cos(\omega \cdot t)) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\gamma} - \\ &ie^{-\gamma t} \sin(\omega \cdot t) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\gamma} + ie^{-\gamma t} \sin(\omega \cdot t) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\gamma} + \\ &(1 + e^{-\gamma t} \cos(\omega \cdot t)) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\gamma}. \end{aligned} \quad (12)$$

هدف از اعمال میدان خارجی به کیوبیت این است که یک دینامیک دلخواه Ξ_f را در زمان نهایی t_f با کمک روش کنترلی بیان شده در بخش قبل شبیه‌سازی کنیم. از آنجائی که این شبیه‌سازی به دینامیک دلخواه Ξ_f بستگی دارد، بنابراین در ادامه سه سناریو با Ξ_f های مختلف در نظر می‌گیریم. این سناریوها در مقاله [۲۰] برای یک یون ریدبرگ در یک محیط نوعی معرفی شده‌اند. در آنجا روش حل مسئله بهینه‌سازی مبتنی بر الگوریتم کراتوف است. با این وجود، در اینجا می‌خواهیم همان سناریوها را برای مثال یک کیوبیت در یک محیط مشخص به کار ببریم و آنها را از طریق روش ارائه‌شده در



شکل ۱. الف) یک میدان بهینه برای جدایش کیوبیت با ماتریس فرایند (۱۳) از محیط خود در زمان $t_f = 30$. در اینجا $\omega_0 = 1$ ، $\mu_0 = 0.2$ ، $\gamma = 0.05$ و $\lambda = 0.02$. افزونه کوچک درون این شکل قدر مطلق درایه غیرقطری ماتریس چگالی القاشده توسط میدان بهینه [منحنی توپر مشکی] و تحول این کمیت را در غیاب میدان خارجی [منحنی خطچین قرمز] نشان می‌دهد. در اینجا حالت اولیه را به صورت $\rho_S(0) = |+\rangle\langle +|$ (ب) مانستگی‌های بهینه \hat{F} [نشان‌های دلتای مشکی]، مؤثر F_e [نشان‌های مربع سبز] و میدان-صفر F_0 [منحنی قرمز] به صورت تابعی از برخی زمان‌های نهایی t_f (جدول ۱ را ببینید). پارامترها همانند الف) غیر از $\lambda = 0.1$.

شکل ۲. الف) در مقایسه با مانستگی‌های به دست آمده از دیگر میدان‌ها، بیشینه باقی می‌ماند. مانستگی میان ماتریس فرایند ناشی از میدان بهینه و ماتریس فرایند آرمانی $\Xi_f^{(D)}$ نسبت به زمان یک رفتار غیریکنوا دارد (منحنی مشکی رنگ شکل ۲. ب). همان گونه که از شکل ۲. ب مشخص است، این مانستگی تنها در زمان نهایی t_f برای میدان بهینه بیشینه است؛ به گونه‌ای که در زمان‌های میانی $t < t_f$ ممکن است این مانستگی برای میدان‌های غیربهینه دیگر بیشتر باشد.

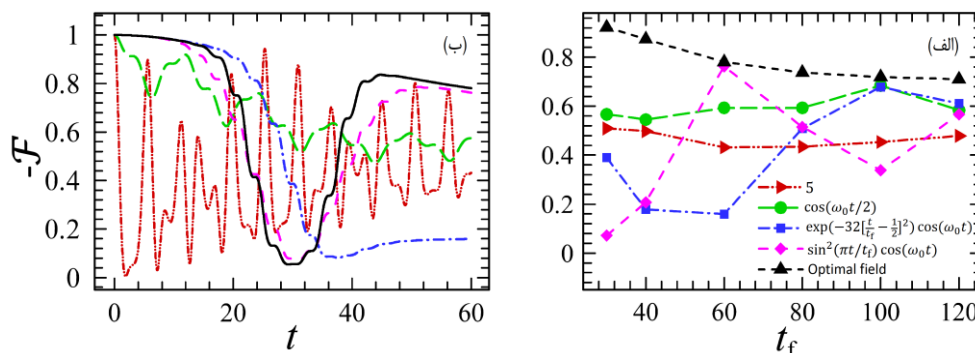
ب. شبیه‌سازی یک دروازه کوانتومی در سناریوی بعدی، هدف ما از روشن کردن میدان کنترل $\mathcal{E}(t)$ ، شبیه‌سازی اثر اعمال یک دروازه کوانتومی O در زمان مشخص t_f است. بنابراین ماتریس فرایند متناظر با این دروازه با توجه به رابطه (۲) از

$$\left[\Xi_f^{(G)} \right]_{\alpha\beta} = \text{Tr}[OC_\alpha^\dagger] \text{Tr}[OC_\beta^\dagger]^*, \quad (14)$$

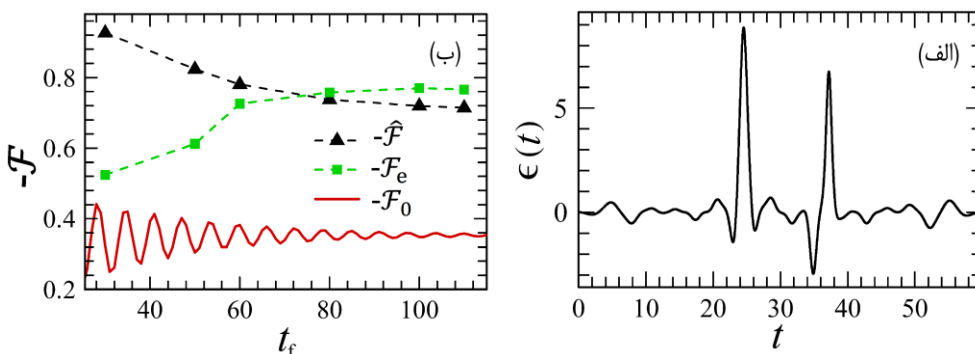
$$\alpha, \beta \in \{1, 2, 3, 4\},$$

به دست می‌آید. به عنوان مثال این دروازه کوانتومی می‌تواند یک چرخش هادامارد به صورت $O = (1/\sqrt{2})(\sigma_x + \sigma_z)$

را نمایش می‌دهد. مانستگی بهینه \hat{F} برای زمان نهایی $t_f = 30$ برابر است با $0.965 \approx$. افزونه کوچک درون شکل ۱. الف تحول زمانی درایه غیرقطری ماتریس چگالی به دست آمده از فرایند بهینه‌سازی را نشان می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد که هم‌دوسی در مقایسه با وضعیت میدان-خاموش و در زمان نهایی به مقدار جزئی افزایش می‌یابد. با استفاده از رابطه‌های (۱۲) و (۱۳) می‌توان مانستگی میدان-صفر (F_0) را برای این سناریو به صورت $F_0 = (1 + e^{-2\gamma t_f}) / \sqrt{2(1 + e^{-4\gamma t_f})}$ به دست آورد که در حد $F_0 \rightarrow 1/\sqrt{2}$ در $t_f \rightarrow \infty$ (منحنی قرمز رنگ شکل ۱. ب) مقایسه مانستگی‌های بهینه (\hat{F}) و میدان-صفر (F_0) با یکدیگر نشان می‌دهد که بهینه‌سازی حتی در زمان‌های بزرگ‌تر از زمان واهلش سامانه یعنی $t > 50$ ، منجر به مانستگی‌های نسبتاً بالا می‌شود. با این وجود در صورتی که محیط به اندازه کافی سامانه را متأثر کند، فرایند بهینه‌سازی دیگر کارایی خود را در کاهش اثرات وادوسی محیط از دست خواهد داد. همچنین مانستگی مؤثر F_e با افزایش مدت زمان تحول سامانه افزایش می‌یابد [منحنی سبز رنگ شکل ۱. ب]. شکل ۲. الف رفتار یکنوای کاهش مانستگی بهینه \hat{F} نسبت به زمان نهایی را نمایش می‌دهد. با تغییر این زمان، مانستگی بهینه [منحنی مشکی رنگ



شکل ۲. (الف) مانستگي F بين فرايند القاشده توسط برخي ميدان‌هاي خارجي و $\Xi_f^{(D)}$ به صورت تابعي از زمان نهايي t_f . در اينجا $\omega_0 = 1$ ، صورت $V(t) = -\mu_0 \mathcal{E}(t) \sigma_y$ است که در آن $\sigma_y = -i(|0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|)$ ماتريس پائولي y است. ب. مانستگي بين ماتريس فرايند القاشده توسط ميدان‌هاي الف و فرايند هدف $\Xi_f^{(D)}$ به صورت تابعي از زمان. مقدار تامي پارامترها همانند (الف) هستند غير از $t_f = 60$.



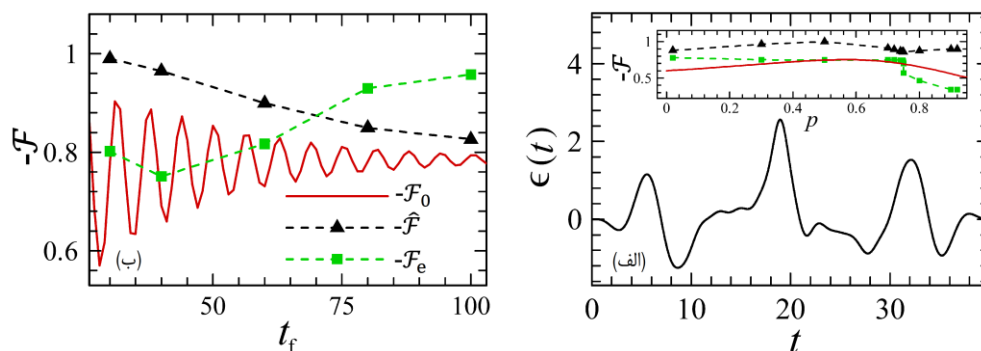
شکل ۳. (الف) یک میدان بهینه برای شبیه‌سازی دروازه هادامارد (۱۴) روی یک کیوبیت در یک محیط وافازی در زمان نهايي $t_f = 60$. در اینجا $\omega_0 = 1$ ، $\mu_0 = 0.2$ ، $\gamma_0 = 0.02$ و $\lambda = 0.1$. (ب) مانستگي‌هاي بهينه \hat{F} [نشان‌هاي دلتای مشکی]، مؤثر \mathcal{F}_e [نشان‌هاي مربع سبز] و میدان-صفر \mathcal{F}_0 [منحنی قرمز] به صورت تابعي از برخي زمان‌هاي نهايي t_f (جدول ۱ را ببينيد). پارامترها همانند شکل ۳ (الف) هستند.

نشان می‌دهد که در این شبیه‌سازی، محیط به تنهایی نمی‌تواند به ما در کسب یک مانستگي نسبتاً بالا کمک کند.

ج. مهندسی غیرمستقیم محیط

در اینجا هدف از اعمال میدان خارجي $\mathcal{E}(t)$ را شبیه‌سازی یک کانال کوانتومی در لحظه t_f قرار می‌دهیم. به عبارت دیگر می‌خواهیم با اعمال میدان به سامانه، عملکرد محیط را به طور دلخواه مهندسی کنیم. به عنوان مثال، با وجود محیط وافازی پیرامون کیوبیت، عملکرد مورد نظر ما از محیط می‌تواند به صورت یک کانال واقطبش به صورت

باشد. شکل ۳. الف یکی از نتایج عددی برای شبیه‌سازی این دروازه در زمان نهايي $t_f = 60$ را نشان می‌دهد که مانستگي بهینه به دست آمده برابر با $0.78 \approx$ است. محاسبه‌هاي عددی نشان دادند که این مانستگي برای طیف وسیعی از زمان‌هاي نهايي t_f نسبتاً بالا است [نشان‌هاي دلتای مشکی در شکل ۳. ب]. علاوه بر این مانستگي میدان-صفر \mathcal{F}_0 برای این سناریو، یک رفتار نوسانی میرا را نسبت به زمان از پیش تعیین شده t_f نشان می‌دهد [منحنی قرمز شکل ۳. ب]. این مانستگي را می‌توان از روابط (۱۲) و (۱۴) به صورت $F_0 = (1 - e^{-\gamma t_f} \cos(\omega t_f)) / (2\sqrt{2(1 + e^{-\gamma t_f})})$ به دست آورد که در آن $F_0 \rightarrow 1/(2\sqrt{2})$ وقتی که $t_f \rightarrow \infty$. این خود



شکل ۴. الف میدان بهینه به عنوان تابعی از زمان t برای شبیه‌سازی کانال کوانتومی $D_p^{(ch)}$ در زمان $t_f = 60$. در اینجا $\omega_0 = 1$ ، $\mu_0 = 0.5$ ، مربع سبز] و میدان-صفر F_0 [منحنی قرمز] به صورت تابعی از p (جدول ۱ را ببینید). مقدار تمامی پارامترهای افزونه با مقدارهای منحنی اصلی یکسان هستند. (ب) مانستگی به صورت تابعی از زمان نهایی t_f . نشان‌های این منحنی با نشان‌های افزونه منحنی (الف) مشابه هستند. مقدار تمامی پارامترها با مقدار پارامترهای منحنی (الف) یکسان هستند.

۴. الف] با مانستگی مؤثر F_e [نشان‌های سبز رنگ افزونه شکل ۴. الف] به عنوان تابعی از p برای یک زمان نهایی مشخص t_f ، در می‌یابیم که بهینه‌سازی برای $p=1$ نسبتاً به خوبی کار می‌کند. به طور متوسط، عملکرد محیط در شبیه‌سازی کانال واقطبش در تمامی زمان‌ها تعیین‌کننده است که این را می‌توان از منحنی قرمز رنگ شکل ۴. ب دریافت کرد. این منحنی مانستگی میدان-صفر (F_0) را به صورت تابعی از زمان نهایی و برای یک p ثابت نشان می‌دهد که برای زمان‌های نهایی بسیار بزرگ این مانستگی به مقدار $(3-2p)/\sqrt{6(4p^2-6p+3)}$ میل می‌کند. یک میدان بهینه می‌تواند میزان عملکرد محیط در شبیه‌سازی کانال کوانتومی مورد نظر را به خصوص در زمان‌های نهایی کوچک افزایش دهد [نشان‌های مشکی رنگ شکل ۴. ب].

۶. نتیجه‌گیری

در این مقاله یک طرح کلی برای کنترل بهینه دینامیک یک سامانه باز ارائه کردیم. این طرح مبتنی بر یک روش مرسوم و پرکاربرد در حوزه مسائل بهینه‌سازی یعنی روش وردشی است. با کمک این روش ما یک سری شرایط لازم برای کنترل کلی دینامیک یک سامانه استخراج کردیم که برای هر هدفی از کنترل

$$D_p^{(ch)}(\rho_s) = (1-p)\rho_s + \frac{p}{3}(\sigma_x \rho_s \sigma_x + \sigma_y \rho_s \sigma_y + \sigma_z \rho_s \sigma_z),$$

با $0 \leq p \leq 1$ باشد. ماتریس فرایند متناظر با این دینامیک دلخواه به صورت

$$\left[\Xi_f^{(ch)} \right]_{\alpha\beta} = 2(1-p)\delta_{\alpha\tau}\delta_{\beta\tau} + \frac{2p}{3}(\delta_{\alpha 1}\delta_{\beta 1} + \delta_{\alpha 2}\delta_{\beta 2} + \delta_{\alpha 3}\delta_{\beta 3}), \quad \alpha, \beta \in \{1, 2, 3, 4\}, \quad (15)$$

است. شکل ۴. الف یکی از این میدان‌های بهینه برای شبیه‌سازی این دینامیک دلخواه در زمان نهایی $t_f = 40$ و برای $p = 0.3$ را نشان می‌دهد. مانستگی بهینه \hat{F} در این شرایط حدوداً 0.94 است، در حالی که مانستگی میدان-صفر F_0 تقریباً برابر با 0.7 است. مانستگی اخیر یک شکل دقیق به صورت $F_0 = \frac{3-2p+(3-4p)e^{-2\gamma t_f} \cos(\omega t_f)}{\sqrt{6(4p^2-6p+3)(1+e^{-2\gamma t_f})}}$ دارد که افزونه شکل ۴. الف [منحنی قرمز] آن را برای زمان $t_f = 40$ و برای تمامی $p \leq 1$ نمایش می‌دهد. برای یک زمان نهایی t_f مشخص، این مانستگی یک مقدار بیشینه به صورت

$$F_{\max}(t_f) = [\sqrt{3}(1+e^{-2\gamma t_f})]^{-1/2} \times [2(1+e^{-2\gamma t_f} \cos(\omega t_f)) + e^{-2\gamma t_f} \cos^2(\omega t_f)]^{1/2},$$

در دارد که $p^* = (1/2)[1 - e^{-2\gamma t_f} \cos(\omega t_f)]$ در واقع یک کران بالا برای میزان اثرگذاری محیط در کسب هدف نهایی است. با مقایسه مانستگی بهینه [نشان‌های مشکی افزونه شکل

باز مبتنی بر روش میکروسکوپی در بسیاری نوشتجات مربوط به سامانه‌های باز کوانتومی با جزئیات شرح داده شده است [۲۶ و ۲۷]. نقطه شروع استخراج این معادله مادر، معادله فون-نویمان برای ماتریس چگالی سامانه کل (سامانه تحریک شده اصلی + محیط) به صورت $d\rho(t)/dt = -(i/\hbar)[h(t), \rho(t)]$ است که در آن $h(t)$ هامیلتونی سامانه کل است. پس از ردگیری جزئی از دو طرف این معادله تحول و سپس اعمال برخی تقریب‌ها همچون تقریب بورن-مارکوف و موج چرخان، معادله لیندبلاد حاکم بر حالت سامانه اصلی به دست خواهد آمد که در شرط بخش‌پذیری [۲۶ و ۲۷] صدق می‌کند. مطابق با این روش، نگاشت دینامیکی حاصل از این معادله مادر یعنی $E_{(s,t)}$ از

$$E_{(s,t)} = T e^{\int_{\leftarrow}^t ds L_s}, \quad (\text{الف. ۱})$$

$$\begin{aligned} [L_t]_{ij, mn} &= -\left(\frac{i}{\hbar}\right)[h_s(t) + h_{\text{Lamb}}] im \delta_{nj} \\ &+ \left(\frac{i}{\hbar}\right)[h_s(t) + h_{\text{Lamb}}] nj \delta_{mi} \\ &+ \sum_{\xi, \nu} \sum_{\omega} \gamma_{\xi\nu}(\omega) \left([a_{\nu}(\omega)] im [a_{\xi}^{\dagger}(\omega)] nj \right. \\ &\left. - \frac{1}{\nu} [a_{\xi}^{\dagger}(\omega) a_{\nu}(\omega)] im \delta_{nj} \right. \\ &\left. - \frac{1}{\nu} [a_{\xi}^{\dagger}(\omega) a_{\nu}(\omega)] nj \delta_{im} \right), \end{aligned} \quad (\text{الف. ۲})$$

برای $i, j, m, n \in \{1, 2, \dots, N\}$ به دست می‌آید که در آن T_{\leftarrow} عملگر ترتیب زمانی است و تعریف $h_s(t)$ ، h_{Lamb} ، $a_{\nu}(\omega)$ و $\gamma_{\xi\nu}(\omega)$ را قبلاً در بخش (۲) آورده‌ایم. با استفاده از رابطه (الف. ۱) می‌توان یک مجموعه از معادله‌های دیفرانسیل برای تحول زمانی درایه‌های نگاشت دینامیکی یعنی $[E_{(s,t)}]_{ij, rs}$ ($i, j, r, s \in \{1, 2, \dots, N\}$) به صورت زیر به دست آورد:

$$\frac{d[E_{(s,t)}]_{ij, rs}}{dt} = \sum_{m, n=1}^N [L_t]_{ij, mn} [E_{(s,t)}]_{mn, rs}. \quad (\text{الف. ۳})$$

از سوی دیگر نگاشت دینامیکی $E_{(s,t)}$ و ماتریس فرایند $\chi(t)$ از طریق رابطه بالای معادله (۲) در متن اصلی به صورت

$$[E_{(s,t)}]_{mn, rs} = \sum_{\alpha, \beta=1}^N \chi_{\alpha\beta}(t) [C_{\alpha}]_{mr} [C_{\beta}^{\dagger}]_{sn},$$

دینامیکی سامانه برقرار است. تمامی این شرایط بر حسب یک تابع نرده‌ای با نام شبه‌هامیلتونی قابل بیان هستند. در صورتی که این شبه‌هامیلتونی وابستگی صریحی به زمان نداشته باشد، آنگاه مقدار آن بر روی مسیر بهینه پایسته است. چنین قضیه‌ای پتانسیل این را دارد که حل برخی مسائل بهینه‌سازی دینامیک یک سامانه را تسهیل کند. برای حل همزمان معادله‌های بهینه‌سازی ما یک الگوریتم تکرار را به کار بردیم که لزوماً یک روش یکنوا همگرا محسوب نمی‌شود. با این وجود یک الگوریتم مناسب برای نمایش کارامدی طرح کنترلی ما مبتنی بر روش وردشی است. ما این الگوریتم را تنها برای شبیه‌سازی‌های دینامیکی در زمان نهائی به کار بردیم و قابلیت تعمیم به مسائل دیگر بهینه‌سازی دینامیکی را نیز دارد. ما این طرح کنترلی را برای سناریوهای مختلفی در فناوری کوانتومی از جمله کاهش وادوسی، شبیه‌سازی یک دروازه کوانتومی و مهندسی غیرمستقیم محیط به کار بردیم. در تمامی این سناریوها یک عمل، دروازه یا کانال کوانتومی در یک زمان دلخواه با اعمال یک میدان بهینه با مانستگی بالا ساخته می‌شود. از ویژگی‌های مهم این طرح مانند طرح کنترلی ارائه شده در مرجع [۲۰] این است که فرایند بهینه‌سازی مستقل از حالت اولیه سامانه (خالص یا مخلوط) انجام می‌شود. دلیل آن هم این است که متغیر دینامیکی در طرح ما ماتریس فرایند است که تمامی خصوصیات یک نگاشت کاملاً مثبت و ردنگهدار را در خود دارد. همچنین در این طرح کنترلی از معادله مادر مارکوفی برای دینامیک یک سامانه باز استفاده کردیم که قبلاً در مرجع [۲۰] استخراج شده است و ما در اینجا با استفاده از روش میکروسکوپی آن را مجدداً استخراج کردیم. قابل ذکر است که طرح کنترلی ارائه شده در اینجا نیز قابل تعمیم به دینامیک‌های پیچیده‌تر از جمله دینامیک‌های نامارکوفی است.

پیوست الف: استخراج معادله مادر دینامیک به روش میکروسکوپی

در اینجا گام‌های لازم برای استخراج معادله مادر (۳) را بیان خواهیم کرد. استخراج معادله مادر ماتریس چگالی یک سامانه

(الف. ۴)

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_{\lambda\mu}(t)}{dt} = & -\left(\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{\alpha=1}^{N^*} \text{Tr}[C_{\lambda}^{\dagger}(h_s(t) + h_{\text{Lamb}})C_{\alpha}] \chi_{\alpha\mu}(t) + \\ & \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{\beta=1}^{N^*} \chi_{\lambda\beta}(t) \text{Tr}[C_{\beta}^{\dagger}(h_s(t) + h_{\text{Lamb}})C_{\mu}] + \sum_{\xi,\nu} \sum_{\omega} \gamma_{\xi\nu}(\omega) \\ & \times \left(\sum_{\alpha,\beta=1}^{N^*} \text{Tr}[C_{\lambda}^{\dagger}a_{\nu}(\omega)C_{\alpha}] \chi_{\alpha\beta}(t) \text{Tr}[C_{\beta}^{\dagger}a_{\xi}^{\dagger}(\omega)C_{\mu}] \right. \\ & - \frac{1}{\nu} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N^*} \text{Tr}[C_{\lambda}^{\dagger}a_{\xi}^{\dagger}(\omega)C_{\beta}] \text{Tr}[C_{\beta}^{\dagger}a_{\nu}(\omega)C_{\alpha}] \chi_{\alpha\mu}(t) \\ & \left. - \frac{1}{\nu} \sum_{\beta=1}^{N^*} \chi_{\lambda\beta}(t) \text{Tr}[C_{\beta}^{\dagger}a_{\xi}^{\dagger}(\omega)C_{\alpha}] \text{Tr}[C_{\alpha}^{\dagger}a_{\nu}(\omega)C_{\mu}] \right), \end{aligned}$$

بازنویسی کنیم. این معادله در واقع شکل مؤلفه‌ای معادله دینامیکی (۳) است.

پیوست ب: شرایط لازم میدان‌های بهینه

ما در اینجا شرایط لازم (معادله‌های (۵) و (۶) متن اصلی) برای کنترل بهینه دینامیکی یک سامانه باز کوانتومی را با جزئیات ارائه می‌کنیم. ما به میدان‌های خارجی بهینه‌ای نیازمندیم که معیار عملکرد (۱) را بهینه (بیشینه یا کمینه) کنند به گونه‌ای که دینامیک سامانه مطابق با معادله مادر فرایند (۳) تحول یابد. برای رسیدن به این هدف، تابعی (۱) را به منظور وارد کردن قید دینامیکی (۳) در آن به صورت زیر تعمیم می‌دهیم:

$$J_a = F(\chi(t_f), t_f) + \int_0^{t_f} dt (G(\chi(t), \epsilon(t), t) + \text{Tr}[\Lambda(t)\{K_{\epsilon}(\chi(t)) - \dot{\chi}(t)\}]) \quad (\text{ب. ۱})$$

که در آن $\dot{\chi} \equiv d\chi(t)/dt$ و عملگر هرمیتی $\Lambda(t)$ یک مضرب لاگرانژ محسوب می‌شود. در اینجا فرض می‌کنیم که تابع F نسبت به متغیرهای خود مشتق پذیر است، بنابراین می‌توانیم این تابع را در زمان $t = t_f$ به صورت

$$F(\chi(t_f), t_f) = F(\chi(0), 0) + \int_0^{t_f} dt \left(\text{Tr} \left[\frac{\partial F(\chi, t)}{\partial \chi^T} \dot{\chi} \right] + \frac{\partial F(\chi, t)}{\partial t} \right), \quad (\text{ب. ۲})$$

بنویسیم که در آن از قاعده زنجیره‌ای برای $dF(\chi, t)/dt$ استفاده کرده‌ایم. از اینجا به بعد وابستگی ضمنی تابع‌ها به زمان‌های میانی $0 \leq t < t_f$ را نمی‌نویسیم. با استفاده از رابطه (ب. ۲)، می‌توانیم تابعی (ب. ۱) را به صورت

$$J_a = \int_0^{t_f} dt G_a(\chi, \Lambda, \dot{\chi}, \epsilon, t), \quad (\text{ب. ۳})$$

به یکدیگر مربوط می‌شوند که در آن $\{C_{\alpha}\}$ پایه‌های فضای عملگری سامانه هستند. با جایگذاری روابط (الف. ۲) و (الف. ۴) درون رابطه (الف. ۳)، معادله زیر به دست خواهد آمد:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N^*} \frac{d\chi_{\alpha\beta}(t)}{dt} [C_{\alpha}]_{ir} [C_{\beta}^{\dagger}]_{sj} = & -\left(\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{\alpha,\beta=1}^{N^*} \chi_{\alpha\beta}(t) [(h_s(t) + h_{\text{Lamb}})C_{\alpha}]_{ir} [C_{\beta}^{\dagger}]_{sj} \\ & + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{\alpha,\beta=1}^{N^*} \chi_{\alpha\beta}(t) [(h_s(t) + h_{\text{Lamb}})C_{\beta}^{\dagger}]_{sj} [C_{\alpha}]_{ir} \\ & + \sum_{\alpha,\beta=1}^{N^*} \sum_{\xi,\nu} \sum_{\omega} \gamma_{\xi\nu}(\omega) \chi_{\alpha\beta}(t) \\ & \times \left([a_{\nu}(\omega)C_{\alpha}]_{ir} [a_{\xi}^{\dagger}(\omega)C_{\beta}^{\dagger}]_{sj} \right. \\ & - \frac{1}{\nu} [a_{\xi}^{\dagger}(\omega)a_{\nu}(\omega)C_{\alpha}]_{ir} [C_{\beta}^{\dagger}]_{sj} \\ & \left. - \frac{1}{\nu} [C_{\beta}^{\dagger}a_{\xi}^{\dagger}(\omega)a_{\nu}(\omega)]_{sj} [C_{\alpha}]_{ir} \right). \end{aligned}$$

دو طرف این معادله را در $[C_{\lambda}^{\dagger}]_{ri} [C_{\mu}]_{js}$ ضرب و سپس بر شاخص‌های $i, j, r, s \in \{1, 2, \dots, N\}$ جمع می‌زنیم. در نتیجه این اعمال جبری، یک معادله دیفرانسیل برای هر درایه ماتریس فرایند به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_{\lambda\mu}(t)}{dt} = & -\left(\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{\alpha=1}^{N^*} \text{Tr}[C_{\lambda}^{\dagger}(h_s(t) + h_{\text{Lamb}})C_{\alpha}] \\ & \times \chi_{\alpha\mu}(t) + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{\beta=1}^{N^*} \chi_{\lambda\beta}(t) \text{Tr}[C_{\beta}^{\dagger}(h_s(t) + h_{\text{Lamb}})C_{\mu}] \\ & + \sum_{\xi,\nu} \sum_{\omega} \gamma_{\xi\nu}(\omega) \\ & \times \left(\sum_{\alpha,\beta=1}^{N^*} \text{Tr}[C_{\lambda}^{\dagger}a_{\nu}(\omega)C_{\alpha}] \chi_{\alpha\beta}(t) \text{Tr}[C_{\beta}^{\dagger}a_{\xi}^{\dagger}(\omega)C_{\mu}] \right. \\ & - \frac{1}{\nu} \sum_{\alpha=1}^{N^*} \text{Tr}[C_{\lambda}^{\dagger}a_{\xi}^{\dagger}(\omega)a_{\nu}(\omega)C_{\alpha}] \chi_{\alpha\mu}(t) \\ & \left. - \frac{1}{\nu} \sum_{\beta=1}^{N^*} \chi_{\lambda\beta}(t) \text{Tr}[C_{\beta}^{\dagger}a_{\xi}^{\dagger}(\omega)a_{\nu}(\omega)C_{\mu}] \right). \end{aligned}$$

که در آن ما از شرط بازبهنجارش عملگرهای پایه استفاده کرده‌ایم. با استفاده از بسط چهارم و پنجم رابطه بالا، می‌توانیم این معادله دیفرانسیل را به صورت

$$\begin{aligned} \delta J_a = & \mathbf{G}_a(\hat{\chi}(t_f) + \delta\chi(t_f), \hat{\Lambda}(t_f) + \delta\Lambda(t_f), \\ & \hat{\chi}(t_f) + \delta\dot{\chi}(t_f), \boldsymbol{\varepsilon}(t_f) + \delta\boldsymbol{\varepsilon}(t_f), t_f) \delta t_f \\ & + \text{Tr} \left[\frac{\partial \mathbf{G}_a(\hat{\chi}(t_f), \hat{\Lambda}(t_f), \dot{\hat{\chi}}(t_f), \boldsymbol{\varepsilon}(t_f), t_f)}{\partial \dot{\hat{\chi}}^T} \delta\chi(t_f) \right] \\ & + \int_{t_0}^{t_f} dt \left\{ \text{Tr} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \chi^T} \delta\chi \right] - \text{Tr} \left[\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \dot{\chi}^T} \right\} \delta\chi \right] \right. \\ & \left. + \text{Tr} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \Lambda^T} \delta\Lambda \right] + \sum_m \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \varepsilon_m} \delta\varepsilon_m \right\}, \end{aligned}$$

که در آن از $\delta\chi(\circ) = \circ$ استفاده کرده‌ایم. بعد از بسط عبارت اول معادله بالا حول جواب بهینه $\hat{\chi}$ ، $\hat{\Lambda}$ و $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ و صرف نظر از عبارت‌های مرتبه بالاتر، این معادله را می‌توانیم به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\begin{aligned} \delta J_a = & \mathbf{G}_a(\hat{\chi}(t_f), \hat{\Lambda}(t_f), \dot{\hat{\chi}}(t_f), \boldsymbol{\varepsilon}(t_f), t_f) \delta t_f \\ & + \text{Tr} \left[\frac{\partial \mathbf{G}_a(\hat{\chi}(t_f), \hat{\Lambda}(t_f), \dot{\hat{\chi}}(t_f), \boldsymbol{\varepsilon}(t_f), t_f)}{\partial \dot{\hat{\chi}}^T} \delta\chi(t_f) \right] \\ & + \int_{t_0}^{t_f} dt \left\{ \text{Tr} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \chi^T} \delta\chi \right] - \text{Tr} \left[\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \dot{\chi}^T} \right\} \delta\chi \right] \right. \\ & \left. + \text{Tr} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \Lambda^T} \delta\Lambda \right] + \sum_m \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \varepsilon_m} \delta\varepsilon_m \right\}, \end{aligned}$$

توجه داشته باشید که

$$\begin{aligned} \delta\chi(t_f) &= \chi(t_f) - \hat{\chi}(t_f) = \delta\chi_f - \hat{\chi}(t_f) \delta t_f \\ \delta\chi_f &= \chi(t_f + \delta t_f) - \hat{\chi}(t_f) \end{aligned}$$

رابطه بالا به صورت

$$\begin{aligned} \delta J_a = & \mathbf{G}_a(\hat{\chi}(t_f), \hat{\Lambda}(t_f), \dot{\hat{\chi}}(t_f), \boldsymbol{\varepsilon}(t_f), t_f) \delta t_f \\ & + \int_{t_0}^{t_f} dt \left\{ \text{Tr} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \chi^T} \delta\chi \right] - \text{Tr} \left[\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \dot{\chi}^T} \right\} \delta\chi \right] \right. \\ & \left. + \text{Tr} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \Lambda^T} \delta\Lambda \right] + \sum_m \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \varepsilon_m} \delta\varepsilon_m \right\} \\ & + \text{Tr} \left[\frac{\partial \mathbf{G}_a(\hat{\chi}(t_f), \hat{\Lambda}(t_f), \dot{\hat{\chi}}(t_f), \boldsymbol{\varepsilon}(t_f), t_f)}{\partial \dot{\chi}^T} \delta\chi(t_f) \right] \\ & - \text{Tr} \left[\frac{\partial \mathbf{G}_a(\hat{\chi}(t_f), \hat{\Lambda}(t_f), \dot{\hat{\chi}}(t_f), \boldsymbol{\varepsilon}(t_f), t_f)}{\partial \dot{\chi}^T} \hat{\chi}(t_f) \right] \delta t_f, \end{aligned}$$

(ب. ۶)

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_a(\chi, \Lambda, \dot{\chi}, \boldsymbol{\varepsilon}, t) &= \mathbf{G}(\chi, \boldsymbol{\varepsilon}, t) \\ &+ \text{Tr}[\Lambda \{ \mathbf{K} \boldsymbol{\varepsilon}(\chi) - \dot{\chi} \}] + \text{Tr} \left[\frac{\partial \mathbf{F}(\chi, t)}{\partial \chi^T} \dot{\chi} \right] + \frac{\partial \mathbf{F}(\chi, t)}{\partial t}, \end{aligned}$$

(ب. ۴)

بازنویسی کنیم. از آنجائی که $\chi(\circ)$ ثابت فرض می‌شود، بنابراین جمله $\mathbf{F}(\chi(\circ), \circ)$ از تابعی \mathbf{J}_a حذف شده است. در اینجا فرض می‌کنیم که زمان نهائی t_f می‌تواند ثابت یا متغیر باشد. در نتیجه، وردش از تابعی \mathbf{J}_a حول مقادیر بهینه به صورت زیر خواهد بود:

$$\begin{aligned} \delta J_a = & \int_{t_0}^{t_f + \delta t_f} dt \mathbf{G}_a(\hat{\chi} + \delta\chi, \hat{\Lambda} + \delta\Lambda, \dot{\hat{\chi}} + \delta\dot{\chi}, \boldsymbol{\varepsilon} + \delta\boldsymbol{\varepsilon}, t) \\ & - \int_{t_0}^{t_f} dt \mathbf{G}_a(\hat{\chi}, \hat{\Lambda}, \dot{\hat{\chi}}, \boldsymbol{\varepsilon}, t) \\ = & \int_{t_0}^{t_f} dt \left\{ \mathbf{G}_a(\hat{\chi} + \delta\chi, \hat{\Lambda} + \delta\Lambda, \dot{\hat{\chi}} + \delta\dot{\chi}, \boldsymbol{\varepsilon} + \delta\boldsymbol{\varepsilon}, t) \right. \\ & \left. - \mathbf{G}_a(\hat{\chi}, \hat{\Lambda}, \dot{\hat{\chi}}, \boldsymbol{\varepsilon}, t) \right\} \\ & + \int_{t_f}^{t_f + \delta t_f} dt \mathbf{G}_a(\hat{\chi} + \delta\chi, \hat{\Lambda} + \delta\Lambda, \dot{\hat{\chi}} + \delta\dot{\chi}, \boldsymbol{\varepsilon} + \delta\boldsymbol{\varepsilon}, t). \end{aligned}$$

که در آن $\delta\chi$ ، $\delta\dot{\chi}$ ، $\delta\Lambda$ و $\delta\boldsymbol{\varepsilon}$ به ترتیب وردش ماتریس فرایند، مشتق زمانی آن، مضرب لاگرانژ و میدان‌های خارجی را نشان می‌دهند. با استفاده از بسط تیلور، انتگرالده اول را حول $\hat{\chi}$ ، $\hat{\Lambda}$ و $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ بسط می‌دهیم که به رابطه زیر برای δJ_a منجر می‌شود:

$$\begin{aligned} \delta J_a = & \int_{t_0}^{t_f + \delta t_f} dt \mathbf{G}_a(\hat{\chi} + \delta\chi, \hat{\Lambda} + \delta\Lambda, \dot{\hat{\chi}} + \delta\dot{\chi}, \boldsymbol{\varepsilon} + \delta\boldsymbol{\varepsilon}, t) \\ & + \int_{t_0}^{t_f} dt \left\{ \text{Tr} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \chi^T} \delta\chi \right] + \text{Tr} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \dot{\chi}^T} \delta\dot{\chi} \right] + \text{Tr} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \Lambda^T} \delta\Lambda \right] \right. \\ & \left. + \sum_m \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \varepsilon_m} \varepsilon_m \right\}, \end{aligned}$$

(ب. ۵)

که در آن $\hat{\mathbf{G}}_a \equiv \mathbf{G}_a(\hat{\chi}, \hat{\Lambda}, \dot{\hat{\chi}}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}, t)$ و ما تنها جمله‌های از مرتبه اول $\delta\chi$ ، $\delta\dot{\chi}$ ، $\delta\Lambda$ و $\delta\boldsymbol{\varepsilon}$ را حفظ کرده‌ایم. نخستین انتگرال را با استفاده از رابطه $\int_a^{a+\delta a} f(x) dx \approx f(a) \delta a$ و همچنین عبارت شامل $\delta\dot{\chi}$ را می‌توان با استفاده از انتگرال‌گیری جزءبه‌جزء ساده کرد. در نتیجه این تغییرها، رابطه (ب. ۵) را به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

هیچ کرانی روی متغیرهای J_a وجود نداشته باشد آنگاه $\delta J_a = 0$. بنابراین شرایط لازم برای جواب بهینه مسئله کنترل بهینه دینامیک یک سامانه باز کوانتومی به صورت زیر خواهد بود:

$$\frac{d\chi}{dt} = K_{\epsilon}(\hat{\chi}), \quad \frac{d\hat{\Lambda}}{dt} = -K_{\epsilon}^{\#}(\hat{\Lambda}) - \frac{\partial G(\hat{\chi}, \epsilon, t)}{\partial \chi^T},$$

$$\frac{\partial G(\hat{\chi}, \epsilon, t)}{\partial \epsilon_m} + \frac{\partial \text{Tr}[\hat{\Lambda} K_{\epsilon}(\hat{\chi})]}{\partial \epsilon_m} = 0,$$

برای هر زمان $t \in [0, t_f]$ و

$$\left(G(\hat{\chi}(t_f), \epsilon(t_f), t_f) + \frac{\partial F(\hat{\chi}(t_f), t_f)}{\partial t} + \text{Tr}[\hat{\Lambda}(t_f) K_{\epsilon}(\hat{\chi}(t_f))] \right) \delta t_f + \text{Tr} \left[\left\{ \frac{\partial F(\hat{\chi}(t_f), t_f)}{\partial \chi^T} - \hat{\Lambda}(t_f) \right\} \delta \chi_f \right] = 0,$$

در زمان $t = t_f$ با تعریف شبه هامیلتونی H به صورت (۴)، چهار رابطه اخیر به شکل معادله‌های (۵) و (۶) در خواهند آمد.

تغییر کند. به راحتی می‌توان رابطه زیر را اثبات کرد:

$$\int_0^{t_f} dt \left\{ \text{Tr} \left[\frac{\partial}{\partial \chi^T} \text{Tr} \left\{ \frac{\partial F(\chi, t)}{\partial \chi^T} \dot{\chi} \right\} \delta \chi \right] + \text{Tr} \left[\left\{ \frac{\partial F(\chi, t)}{\partial \chi^T} \right\} \delta \chi \right] - \text{Tr} \left[\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial}{\partial \dot{\chi}^T} \text{Tr} \left[\frac{\partial F(\chi, t)}{\partial \chi^T} \dot{\chi} \right] \right\} \delta \chi \right] \right\} = 0. \quad (\text{ب. ۷})$$

با جایگذاری رابطه (ب. ۷) در رابطه (ب. ۴) و سپس استفاده از رابطه (ب. ۷)، شکل نهایی زیر برای δJ_a به دست خواهد آمد:

$$\delta J_a = \left(G(\hat{\chi}(t_f), \epsilon(t_f), t_f) + \frac{\partial F(\hat{\chi}(t_f), t_f)}{\partial t} + \text{Tr}[\hat{\Lambda}(t_f) K_{\epsilon}(\hat{\chi}(t_f))] \right) \delta t_f + \text{Tr} \left[\left\{ \frac{\partial F(\hat{\chi}(t_f), t_f)}{\partial \chi^T} - \hat{\Lambda}(t_f) \right\} \delta \chi_f \right] + \int_0^{t_f} dt \left\{ \text{Tr} \left[\left\{ \frac{\partial G(\hat{\chi}, \epsilon, t)}{\partial \chi^T} + \frac{\partial \text{Tr}[\hat{\Lambda} K_{\epsilon}(\hat{\chi})]}{\partial \chi^T} + \frac{d\hat{\Lambda}}{dt} \right\} \delta \chi \right] + \sum_m \left\{ \frac{\partial G(\hat{\chi}, \epsilon, t)}{\partial \epsilon_m} + \frac{\partial \text{Tr}[\hat{\Lambda} K_{\epsilon}(\hat{\chi})]}{\partial \epsilon_m} \right\} \delta \epsilon_m + \text{Tr}[\{K_{\epsilon}(\hat{\chi}) - \dot{\hat{\chi}}\} \delta \Lambda] \right\}.$$

(ب. ۸)

بر اساس قضیه اساسی حساب وردش‌ها [۱۱]، در صورتی‌که

مراجع.

1. J P Palao and R Kosloff, *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 188301.
2. M H Goerz, *et al.*, *Phys. Rev. A* **90** (2014) 032329.
3. F Verstraete, M M Wolf, and J I Cirac, *Nat. Phys.* **5** (2009) 633.
4. S Diehl, *et al.*, *Nat. Phys.* **4** (2008) 878.
5. P Rebentrost, *et al.*, *New J. Phys.* **11** (2009) 033003.
6. D Braun, *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 277901.
7. D A Lidar and T A Brun, "Quantum Error Correction" Cambridge University Press, Cambridge, England (2013).
8. D A Lidar, *Adv. Chem. Phys.* **154** (2014) 295.
9. L Viola, E Knill, and S Lloyd, *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 2417.
10. L Viola, *J. Mod. Opt.* **51** (2004) 2357.
11. D E Kirk, "Optimal Control Theory: An Introduction" Courier Corporation (2004)
12. D D Alessandro, "Introduction to Quantum Control and Dynamics" Chapman & Hall (2008).
13. S Cong, "Control of Quantum Systems: Theory and Methods" John Wiley & Sons, New York (2014).
14. U Boscain, M Sigalotti, and D Sugny, *PRX Quantum* **2** (2021) 030203.
15. A Bartana, R Kosloff, and D J Tannor, *Chem. Phys.* **267**, (2001) 195.
16. V Cavina, *et al.*, *Phys. Rev. A* **98** (2018) 012139.
17. M A Nielsen, *Phys. Lett. A* **303** (2002) 249.
18. M H Goerz, D M Reich, and C P Koch, *New J. Phys.* **16** (2014) 055012.
19. M A Nielsen and I L Chuang, "Quantum Computation and Quantum Information" Cambridge University Press, Cambridge, England (2010).
20. V Rezvani and A T Rezakhani, *Phys. Rev. A.* **104** (2021) 012215.
21. V F Krotov, "Global Methods in Optimal Control" Marcel Dekker, New York (1996).
22. A I Konnov and V F Krotov, *Autom. Remote. Control* **60** (1999) 1427.

23. S E Sklarz and D J Tannor, *Phys. Rev. A* **66** (2002) 053619.
24. W Zhu and H Rabitz, *J. Chem. Phys.* **109** (1998) 385.
25. Y Ohtsuki, G Turinici, and H Rabitz, *J. Chem. Phys.* **120** (2004) 5509.
26. H P Breuer and F Petruccione, “*The Theory of Open Quantum Systems*” Oxford University Press, New York (2002).
27. À Rivas and S F. Huelga, “*Open Quantum Systems*” Springer, Berlin (2012).
28. I L Chuang and M A Nielsen, *J. Mod. Opt.* **44** (1997) 2455.
29. G M D’Ariano and P Lo Presti, *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001) 4195.
30. J B Altepeter, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003) 193601.
31. J Emerson, *et al.*, *Science* **317** (2007) 1893.
32. M Mohseni, A T Rezakhani, and D A Lidar, *Phys. Rev. A* **77** (2008) 032322.
33. A Bendersky, F Pastawski, and J P Paz, *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 190403.