

Ising 耦合体系中量子傅里叶变换的优化

凌宏胜 田佳欣 周淑娜 魏达秀

Time-optimized quantum QFT gate in an Ising coupling system

Ling Hong-Sheng Tian Jia-Xin Zhou Shu-Na Wei Da-Xiu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 170301 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.170301

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.170301>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I17>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

三维传输子量子比特的退相干参数表征

Decoherence characterization of three-dimensional transmon

物理学报.2014, 63(22): 220305 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.220305>

表面离子阱的衬底效应模型研究及新型离子阱设计

Substrate effect on surface-electrode ion trap and hybrid design for ion trap

物理学报.2014, 63(6): 060303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.060303>

初态对光波导阵列中连续量子行走影响的研究

Effects of initial states on continuous-time quantum walk in the optical waveguide array

物理学报.2013, 62(9): 090301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.090301>

超导量子比特的耦合研究进展

Progress of coupled superconducting qubits

物理学报.2013, 62(1): 010301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.010301>

Ising耦合体系中量子傅里叶变换的优化*

凌宏胜 田佳欣 周淑娜 魏达秀†

(华东师范大学物理系, 上海市磁共振重点实验室, 上海 200062)

(2015年3月17日收到; 2015年4月28日收到修改稿)

量子傅里叶变换是量子计算中一种重要的量子逻辑门. 任意量子位的傅里叶变换可以分解为一系列普适的单比特量子逻辑门和两比特量子逻辑门, 这种分解方式使得傅里叶变换的实验实现简单直观, 但所用的实验时间显然不是最短的. 本文利用优化控制和数值计算方法对 Ising 耦合体系中多量子位傅里叶变换的实验时间进行优化, 优化后的实现方法明显短于传统方法. 优化方法的核磁共振实验实现验证了其有效性.

关键词: 核磁共振, 优化控制, 量子傅里叶变换

PACS: 03.67.Lx, 76.70.-k

DOI: 10.7498/aps.64.170301

1 引言

量子傅里叶变换 (quantum Fourier transform, QFT) 是经典离散傅里叶变换的量子对应^[1-4], 是一种基本的量子逻辑门, 是各种量子算法的核心部件, 如质因子分解的 Shor 算法^[5]、顺序搜索 (order finding) 算法^[6]、隐子群问题 (hidden subgroup problem)^[1,7,8] 以及后来被人们提出的各种量子搜索算法^[9] 等. 目前量子傅里叶变换能够在多种物理体系中得以实现, 包括核磁共振体系^[10,11], 量子 QED^[12], 光子^[13], 离子阱^[14] 等体系. 同时量子傅里叶变换还能应用于量子通讯中, 用于实现多方之间的量子密钥分发^[15].

量子傅里叶变换的数学表述如下, 给定任意正整数, 总有 $0 < x < q$, 其中 $q = 2^n$, 任意量子态 $|x\rangle$ 的量子离散傅里叶变换为

$$|x\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_a^{2^n-1} e^{2\pi i a x} |a\rangle. \quad (1)$$

通常情况下, 一个 n 量子比特的量子傅里叶变换操作可以分解为一系列的单量子比特逻辑门和双量子比特逻辑门的组合, 这种分解使得实现 n 比特的 QFT 的复杂性与 n^2 成正比^[16]. 随着量子位的增

加, 量子傅里叶变换的实验时间必然显著增长, 进而导致量子计算任务的实验时间变长, 不利于其向高位扩展.

优化控制方法近年来在缩短量子门的实现时间, 减小其复杂性方面有较为广泛的应用. 目前人们用到的优化控制方法包括解析法^[17-19] 和数值法^[20,21], 解析法的思路是将么正变换的分解方式映射成为在几何球面上寻找最短路径的问题^[18]; 数值法主要基于两种梯度计算方法, 即 GRAPE (gradient ascent pulse engineering)^[20] 算法和 Krotov 算法^[21], 迄今为止, 优化算法的应用主要集中在核磁共振领域^[22], 包括磁共振成像, 液态及固态核磁共振以及核磁共振量子计算^[23-26]. 其中优化控制量子计算使得么正变换的实验时间明显缩短^[27,28], 由此可以增加一定时间之内能够实现的量子逻辑门数目.

本文中我们将探讨优化控制方法在量子傅里叶变换中的应用, 主要研究 Ising 耦合网络中, 优化的傅里叶变换的实验时间, 并与相应的传统方法进行对比. 为了进一步证实优化傅里叶变换的有效性, 最后我们在核磁共振谱仪上实验实现了优化量子傅里叶变换的脉冲序列. 通过选定不同的初态, 将实验谱图与模拟谱图进行比较, 验证了优化的脉

* 国家自然科学基金 (批准号: 11005039) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: dxwei@phy.ecnu.edu.cn

冲序列的有效性.

2 数值计算的优化控制方法

传统的核磁共振脉冲序列主要由一个个脉冲(包括硬脉冲和软脉冲)和适当的延时组成,通常情况下,一次采样中每个脉冲的相位是固定不变的.利用 GRAPE 算法实现的优化控制方法则将脉冲和延时整合在一起,将脉冲序列分成一个或多个脉冲模块,每个脉冲模块由成千上万的小脉冲片断组成,其脉冲幅度和相位各不相同,同时还能将磁场的均匀性,脉冲的最大幅度等考虑到数值计算中.优化脉冲所具有的高自由度使得其脉冲宽度能够被适当地优化和缩短.优化控制方法可以用于实现核磁共振体系中状态的转化,也可以对相应的幺正变换进行优化,得到一个时间优化的传播子.目前 GRAPE 算法已被应用于开源软件 SIMPSON 模拟程序,为了得到一个优化脉冲,人们只需运行根据自旋体系的耦合特点编写的 tcl 程序就能得到相应的优化脉冲. GRAPE 算法的主要过程如下^[20]:对于一个相干时间足够长的封闭自旋体系,其状态随时间的演化满足 Liouville-von Neuman 方程,

$$\dot{\rho}(t) = -i[H(t), \rho(t)], \quad (2)$$

这里 $\rho(t)$ 为自旋体系的密度算符, $H(t)$ 为体系的整理哈密顿量, $H(t) = H_0 + \sum_k u_k(t)H_k$, 哈密顿量分成两部分,包括系统的内部哈密顿量 H_0 和外部哈密顿量 H_k , 内部哈密顿量主要包括各个自旋的化学位移项和自旋之间的耦合项,外部哈密顿量主要为幅度为 $u_k(t)$ 的外加射频场的作用.在以上的哈密顿量的作用下,任意一个幺正算符的演化满足如下方程:

$$\dot{U} = -iH(t)U. \quad (3)$$

假设一个总长度为 T 的数值脉冲序列由 N 个小脉冲片断构成,整个脉冲的幺正算符可以表示为每个小脉冲的算符演化的乘积,即

$$U = U_N U_{N-1} \cdots U_j \cdots U_1, \quad (4)$$

这里 U_j 是第 j 个脉冲的时间传播子,

$$U_j = e^{-i\Delta t(H_0 + \sum_k u_k(j)H_k)}.$$

假设存在一个已知的幺正变换算符 U_D , 实验上实现该算符的脉冲序列对应的传播子为 U , 当满足 $\|U - U_D\|^2 = 0$ 时, 脉冲序列的传播子 U 与

算符 U_D 是完全相等的, 即实验脉冲序列真正实现该幺正算符. 优化控制的过程正是通过不断调节 N 个小脉冲片断的幅度和相位, 最终使得脉冲的传播子 U 尽可能的接近于幺正变换算符 U_D , 即 $\|U - U_D\|^2$ 的数值尽可能的小, 同时使特征函数 $\Phi = |\text{Tr}\{U_D^\dagger U\}|^2$ 的数值尽可能的大.

根据 GRAPE 算法的理论, U_j 的梯度近似为

$$\frac{\delta U_j}{\delta u_k(j)} = -i\Delta t H_k U_j. \quad (5)$$

另一方面, 特征函数数 Φ 的梯度为

$$\frac{\delta \Phi}{\delta u_k(j)} = 2\Delta t \text{Im}\{\text{Tr}\{U_D^\dagger U_N \cdots U_{j+1} H_k U_j \cdots U_1\} \times \text{Tr}\{U^\dagger U_D\}\}, \quad (6)$$

按照如下规律变换脉冲的幅度, 特征函数的数值将会逐渐变大,

$$u_k(j) = u_k(j) + \epsilon \frac{\delta \Phi}{\delta u_k(j)}. \quad (7)$$

最后得到的优化脉冲对应的传播子与幺正变换 U_D 的保真度定义为

$$f = \frac{|\text{Tr}\{U_D^\dagger U\}|^2}{|\text{Tr}\{U_D^\dagger U_D\}|^2}. \quad (8)$$

在进行优化控制数值计算过程中, 为了提高特征函数的数值, 可调节的参数包括脉冲的脉宽, 包含的小脉冲片断的个数, 射频脉冲的幅度等. 另外如果将射频脉冲的不均匀性输入到计算程序中, 得到的脉冲便可以克服磁场不均匀性的影响, 从而使得脉冲的效率得到一定程度的提高.

3 量子傅里叶变换的数值优化

以线性耦合网络(Ising coupling)为例, 假设体系包含 n 个自旋为 $1/2$ 的量子比特, 相邻的两个自旋之间存在大小相等的标量耦合, 即 $J_{12} = J_{23} = \cdots = J_{n-1,n} = J$, 其余的耦合为 0 . 文献^[28]中讨论了这种耦合体系下, 优化控制方法在量子傅里叶变换中的应用, 从理论上展示了量子位数不同时, 利用优化方法和传统方法实现 QFT 所对应的脉冲实验时间, 得出的结论是随着量子位数的增加, 优化方法能够极大地缩短脉冲时间. 这里我们主要讨论 3 量子位的 QFT 的优化控制, 根据文献^[28]中的不同量子位的优化控制 QFT 的脉冲时间对照表可知, 线性耦合的三量子比特优化控制 QFT 逻辑门需要的最短时间为

2.05/ J , 而用标准的逻辑门分解的方法则需要的时间为8.13/ J . 很明显, 优化控制使得QFT的时间缩短了大约4倍. 对于耦合常数为 $J = 88$ Hz的三个自旋(I_1, I_2, I_3), 我们利用OC-SIMPSON软件编写了数值计算的优化控制程序, 通过条件对程序的参数进行调节, 得到了保真度为99.9%的实现

QFT的脉冲序列, 脉冲的幅度和相位随时间的变化如图1所示, 其中(a)为脉冲的幅度, (b)为脉冲的相位, 上下两行分别对应的是 ^1H , ^{15}N 的幅度和相位, 整个脉冲的时间为23.3 ms. 为了验证得到的优化脉冲的有效性, 我们在核磁共振上实验实现了该脉冲.

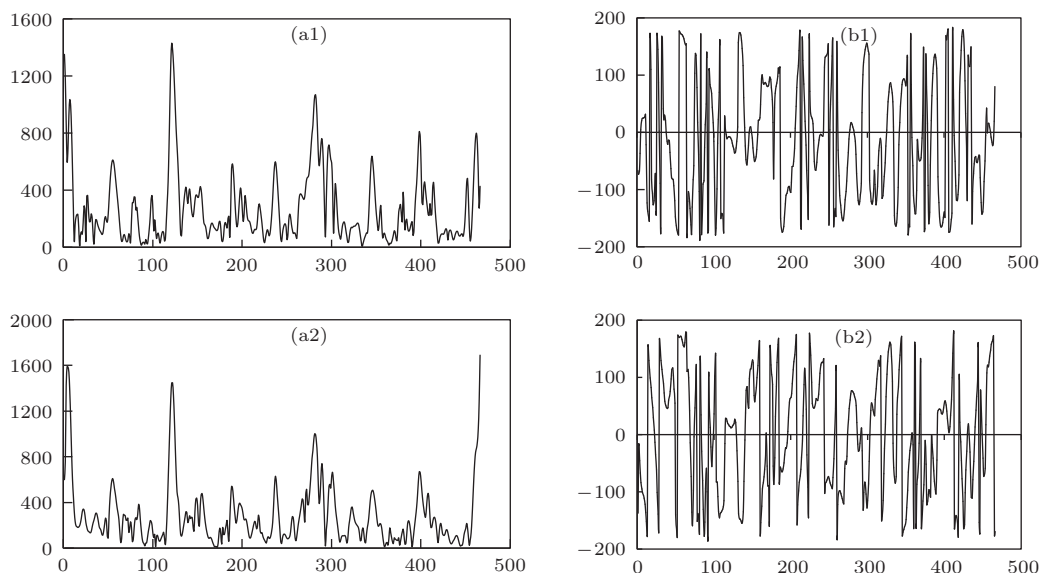


图1 优化QFT的脉冲序列 (a1), (b1)分对应 ^1H 的脉冲的幅度和相位; (a2), (b2)分对应 ^{15}N 的脉冲的幅度和相位

Fig. 1. The optimal control pulse sequence for QFT. (a1) and (b1) correspond to pulse amplitude and pulse phase for ^1H spin, respectively. (a2) and (b2) correspond to pulse amplitude and pulse phase for ^{15}N spin, respectively.

4 优化控制傅里叶变换的核磁共振实验实现

量子傅里叶变换的优化脉冲是在Bruker AVANCE 500核磁共振谱仪上实现的, 选择的样品分子为 ^{15}N 标记的乙酰胺(NH_2COCH_3), $-\text{NH}_2$ 基团中的两个氢原子核对应自旋和 I_1, I_3 , ^{15}N 原子核则对应自旋 I_2 , 耦合常数为 $J_{12} = J_{23} = 88$ Hz,

$J_{13} = 2.6$ Hz, J_{13} 的数值与 J_{12} 和 J_{23} 的数值相比可近似视为0. 自旋 I_1 和 I_3 的化学位移为306 Hz. 为了验证实现的QFT优化脉冲的有效性, 我们选取了几种不同的初态作为实验的起点, 选择的初态及对应的末态的积算符形式如表1所示. 其中下标1, 2, 3分别表示自旋 I_1, I_2, I_3 ; x, y, z 分别代表三种泡利矩阵的分量. 通过观测不同的初态对应的末态的谱线, 它们的模拟谱线和实验谱线的相似性证实了优化脉冲的准确性.

表1 初态与经过量子傅里叶变换后得到的末态的对应表
Table 1. The initial and corresponding final states transformed by QFT.

初态	末态
I_{1x}	I_{3z}
I_{2x}	$0.5(I_{2z} + I_{2z}I_{3z} - I_{2x}I_{3z} + 0.5I_{2x} - 0.5I_{2y} + I_{2y}I_{3z} - I_{1x}I_{2x} + 2I_{1x}I_{2x}I_{3z} - I_{1x}I_{2y} + 2I_{1x}I_{2y}I_{3z})$
I_{3x}	$0.25I_{1z} + 0.5I_{1z}I_{3z} + 1.2072I_{1z}I_{2z} - 0.4144I_{1z}I_{2z}I_{3z} - 0.6036I_{1y} + 0.5I_{1y}I_{2z} + 0.2072I_{1y}I_{3z} + I_{1y}I_{2z}I_{3z}$
I_{1z}	$0.25(I_{3x} + 2.414I_{3y} + 2I_{1x}I_{3x} - 0.414I_{1x}I_{3y} + 2I_{2x}I_{3x} + 2 \times 1.414I_{2y}I_{3x} - 2I_{2x}I_{3y} + 4I_{1x}I_{2x}I_{3x} - 4 \times 1.414I_{1x}I_{2y}I_{3x} - 4I_{1x}I_{2x}I_{3y})$
I_{2z}	$0.5(I_{2x} + I_{2y} + 2I_{1x}I_{2x} - 2I_{1x}I_{2y})$
I_{3z}	I_{1x}

图2中展示了对不同初态施加优化脉冲后得到的谱图, 其中(A)列对应的是模拟谱图, (B)列对应的是实验谱图, 第(1)行到第(6)行的方框分别对应初态为 $I_{1x}, I_{2x}, I_{3x}, I_{1z}, I_{2z}, I_{3z}$ 时的谱线. 每一行的方框内, 图(a)表示初态的谱线, 图(b)表示对初态施加优化脉冲后得到的末态的谱线. 这里初态 I_{iz} ($i = 1, 2, 3$) 的谱线是通过对其施加90度读脉冲后得到的. 初态 I_{1z} 对应的末态的密度矩阵比较

复杂, 为了更全面地观测其末态, 我们在优化脉冲后对自旋2施加了一个沿 y 方向的90度脉冲, 使其末态变为 $0.25(I_{3x} + 2.414I_{3y} - 2I_{2z}I_{3x} + 2I_{2z}I_{3y})$, 对应的谱线如第(4)行中的(c)所示. 图2中左右两列的模拟谱线和实验谱线的一致性表明了优化的QFT能够让初态以较高的保真度演化成相应的末态.

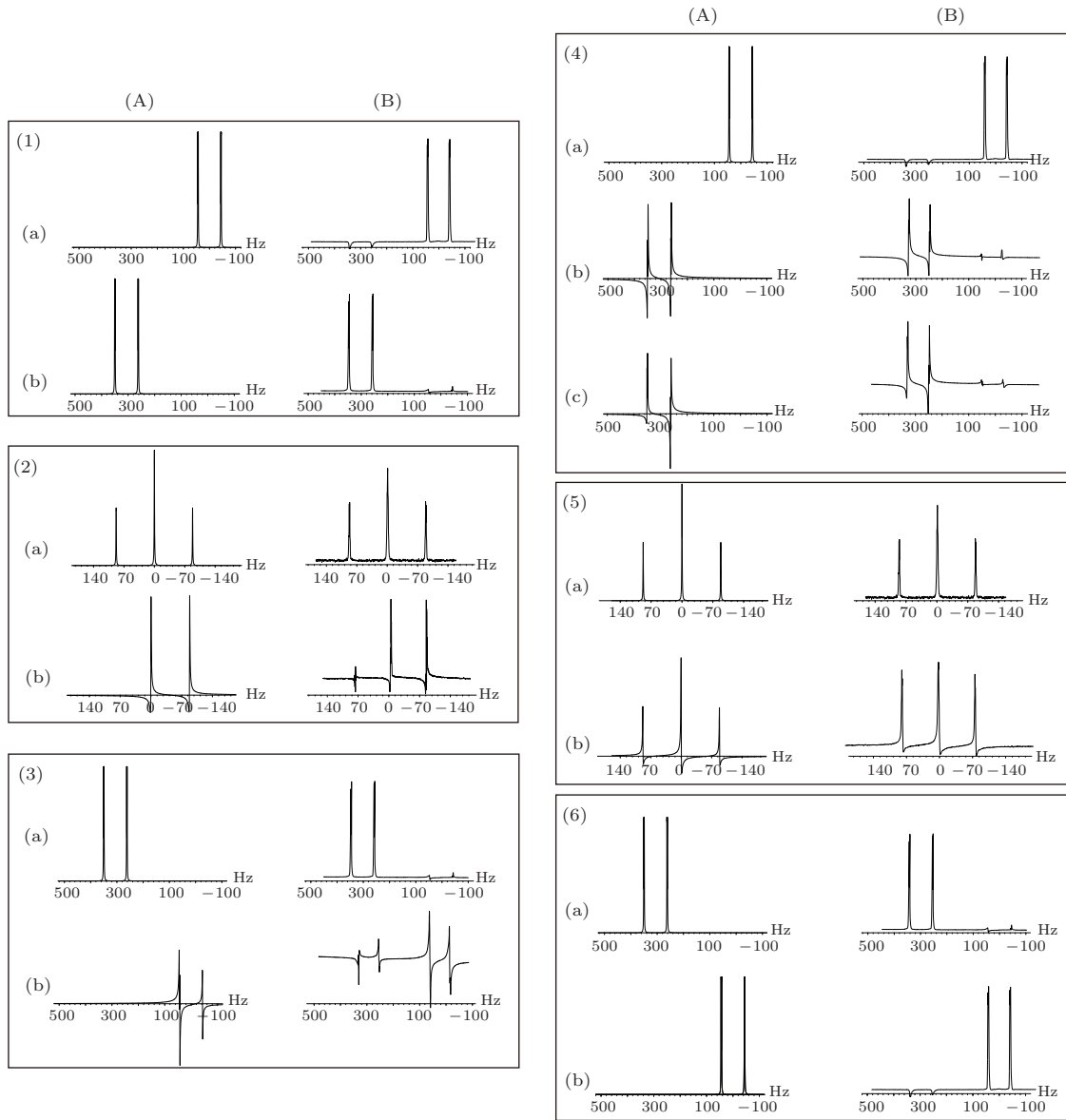


图2 实验优化QFT得到的模拟谱(A)和实验谱(B)

Fig. 2. Simulation spectra (A) and experimental spectra (B) transformed by QFT.

5 结 论

本文中我们利用数值计算的优化控制方法得

到了线性耦合体系中三自旋的量子傅里叶变换的核磁共振脉冲序列, 与用标准逻辑门的分解方法所需的脉冲长度相比, 优化的方法明显节省了更多的时间. 随着量子位数的增加, 优化脉冲的优越性逐

渐增加, 该优化脉冲在核磁共振仪器上得到了实验验证, 实验谱图与相应的模拟谱图的一致性证实了优化脉冲能够准确地实现状态的转变.

本文的理论和实验工作得到了慕尼黑理工大学的 Glaser 教授的有益指导. 感谢实验室的余亦华教授为实验提供的帮助.

参考文献

- [1] Nielsen M A, Chuang I L 2000 *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [2] Long G L 2010 *Physics* **39** 0
- [3] Fu X Q, Bao W S, Li F D, Zhang Y C 2014 *Chin. Phys. B* **23** 020306
- [4] Weinstein Y S, Pravia M A, Fortunato E M, Lloyd S, Cory D G 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1889
- [5] Shor P 1994 *Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring*. Proc. 35th Ann. Symp. on Found. Of Comp. Sci. (IEEE Comp. Soc. Press) pp124–134
- [6] Ekert A, Jozsa R 1996 *Rev. of Mod. Phy* **68** 733
- [7] D'Ariano G M, Macchiavello C, Sacchi M F 1998 *Phys. Lett. A* **248** 103
- [8] Cooley J W, Tukey J W 1965 *Math Comput.* **19** 297
- [9] Pang C Y, Hu B Q 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3220
- [10] Fang X M, Zhu X W, Feng M, Mao X A, Du D 2000 *Chin. Sci. Bull.* **45** 1071
- [11] Yaakov S, Weinstein W, Lloyd S, Cory D G 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1889
- [12] Yu L B, Xue Z Y 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 070305
- [13] Ren G, Du J M, Yu H J 2014 *Chin. Phys. B* **23** 024207
- [14] Zheng S B 2007 *Common. Theor. Phys.* **47** 1049
- [15] Huang D Z, Chen Z G, Guo Y 2009 *Common. Theor. Phys.* **51** 221
- [16] Beth T, Verfahren der schnellen Fourier-Transformation. Teubner, Stuttgart, 1984
- [17] Khaneja N, Li J S, Kehlet C, Luy B, Glaser S J 2004 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **101** 14742
- [18] Khaneja N, Heitmann B, Spörl A, Yuan H, Schulte-Herbrüggen T, Glaser S J 2007 *Phys. Rev. A* **75** 012322
- [19] Carlini A, Koike T 2013 *J. Phys. A: Math. Theor.* **46** 045307
- [20] Khaneja N, Reiss T, Kehlet C, Schulte-Herbrüggen T, Glaser S J 2005 *J. Magn. Reson.* **172** 296
- [21] Maximov I, Tosner Z, Nielsen N C 2008 *J. Chem. Phys.* **128** 184505
- [22] Tosner Z, Vosegaard T, Kehlet C T, Khaneja N, Glaser S J, Nielsen N C 2009 *J. Magn. Reson.* **197** 120
- [23] Li Z K, Yung M H, Chen H W, Lu D W, Whitfield J D, Peng X H, Aspuru-Guzik A, Du J F 2011 *Sci. Rep.* **1** 88
- [24] Lu D W, Xu N Y, Xu R X, Chen HW, Gong J B, Peng X H, Du J F 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 020501
- [25] Feng G R, Xu G F, Long G L 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 190501
- [26] Feng G R, Lu Y, Hao L, Zhang F H, Long G L 2013 *Sci. Rep.* **3** 2232
- [27] Wei D X, Spörl A, Chang Y, Khaneja N, Yang X D, Glaser S J 2014 *Chem. Phys. Lett.* **612** 143
- [28] Schulte-Herbrüggen T, Spörl A, Khaneja N, Glaser S J 2005 *Phys. Rev. A* **72** 042331

Time-optimized quantum QFT gate in an Ising coupling system*

Ling Hong-Sheng Tian Jia-Xin Zhou Shu-Na Wei Da-Xiu[†]

(Physics Department and Shanghai Key Laboratory of Magnetic Resonance, East China Normal University, Shanghai 200062, China.)

(Received 17 March 2015; revised manuscript received 28 April 2015)

Abstract

Quantum Fourier transform (QFT) is a quantum analogue of the classical discrete Fourier transform. It is a fundamental quantum gate in quantum algorithms which has an exponential advantage over the classical computation and has been excessively studied. Normally, an n -qubit quantum Fourier transform could be resolved into the tensor product of n single-qubit operations, and each operation could be implemented by a Hadamard gate and a controlled phase gate. Then the complexity of an n -qubit QFT is of order $O(n^2)$. To reduce the complexity of quantum operations, optimal control (OC) method has recently been used successfully to find the minimum time for implementing a quantum operation. Up to now, two types of quantum optimal control methods have been presented, i.e. analytical and numerical methods. The analytical approach is to change the problem of efficient synthesis of unitary transformations into the geometrical one of finding the shortest paths. Numerical optimal control procedures are based on the gradient methods (GRAPE, Gradient Ascent Pulse Engineering) and Krotov methods. Notable application mainly focus on nuclear magnetic resonance fields, including imaging, liquid-state NMR, solid-state NMR, and NMR quantum computation. One obvious advantage of optimal control NMR quantum computation is that the OC unitary evolution transformation pulse sequences are normally shorter than the conventional corresponding ones. Here we use the optimal control method to find the minimum duration for implementing QFT quantum gate. A linear spin chain with nearest-neighbor Ising interaction is used to find the optimization. And the optimized pulse sequence is experimentally demonstrated on an NMR quantum information processor. By using optimal control method with numerical calculation, a three-qubit QFT in an indirect-linear-coupling chain system is optimized. The duration of the OC QFT is obviously shorter than that of conventional approaches. The OC pulse sequence has been experimentally implemented on a liquid-state NMR spectrometer. To verify the optimally controlled pulse sequence for the three-qubit QFT, different initial states are assumed. The accuracy of the OC pulse sequence could be demonstrated by the consistency of theoretical simulation spectra with the experimental results. The good consistency between the simulation and the experimental spectra demonstrates that the OC QFT is of high fidelity.

Keywords: nuclear magnetic resonance (NMR), optimal control, quantum Fourier transform (QFT)

PACS: 03.67.Lx, 76.70.-k

DOI: 10.7498/aps.64.170301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11005039).

[†] Corresponding author. E-mail: dxwei@phy.ecnu.edu.cn