



量子系统辨识与参数估计

王元龙^{1*}, 肖水鑫², 余其³, 董道毅²

1. 中国科学院数学与系统科学研究院, 北京 100190;

2. School of Engineering, Australian National University, Canberra, ACT 2601, Australia;

3. Centre for Quantum Dynamics, Griffith University, Brisbane, QLD 4111, Australia

E-mail: wangyuanlong@amss.ac.cn, shuixin.xiao@anu.edu.au, yuqivicky@outlook.com, daoyi.dong@anu.edu.au

收稿日期: 2023-12-04; 接受日期: 2024-03-01; 网络出版日期: 2024-04-01; * 通信作者

国家自然科学基金 (批准号: 12288201) 资助项目

摘要 量子信息的飞速发展对人们调控量子系统的能力提出了更高的要求, 而对量子系统进行辨识与参数估计是进行量子控制的基本且重要的环节. 本文综述量子系统辨识和参数估计这一方向, 侧重于量子度量学、量子层析、量子滤波和量子噪声谱学 4 个分支, 介绍其问题建模、分析工具、求解方法及不同的应用等.

关键词 量子系统 量子度量学 量子层析 量子滤波 量子噪声谱学

MSC (2020) 主题分类 81-02, 81-08, 81P18, 81Q93, 81S22, 81S25, 93B30, 93E11

1 引言

1.1 概述

量子力学是描述原子及亚原子尺度物理规律的学科, 自 20 世纪初创立以来不断发展、成熟, 成为现代物理学两大基本支柱之一. 随着计算机科学和信息论等的诞生和发展, 量子力学与其结合形成了交叉学科量子信息^[175], 旨在利用量子系统的独特特征操纵与处理信息, 从而实现超越经典 (即非量子力学的) 方案性能的新一代信息技术, 如量子模拟^[87]、量子通信^[102]、量子计算^[73] 和量子传感^[69] 等.

量子信息自 20 世纪后期以来飞速发展, 对人们调控量子系统的能力也提出了更高的要求, 催生了量子控制—在原子、分子尺度上对物理、化学过程进行主动操控^[40]—这一方向的诞生^[8, 64, 74, 201]. 在经典控制论中, 系统辨识和参数估计作为建模与定参的环节, 是后续进行系统控制的重要先导. 同样地, 对量子系统进行控制, 首先需要对其模型与参数有足够全面和准确的了解, 即对量子系统进行辨识与参数估计^[75]. 这项任务, 按照文献^[41]中的定义, 需要根据某个量子力学过程的输入输出行为估计该过程的要素.

英文引用格式: Wang Y, Xiao S, Yu Q, et al. Quantum system identification and parameter estimation (in Chinese). Sci Sin Math, 2024, 54: 785–822, doi: 10.1360/SSM-2023-0332

量子系统辨识与参数估计是一个高度交叉的方向, 涉及物理学、数学和信息科学等诸多学科, 尤其需要从数学的一系列分支获取理论与应用的支持. 反过来, 量子系统数学模型下的非交换特征又促进了已有数学理论的进一步推广. 例如, 经典的 Cramér-Rao (CR) 不等式出于量子参数估计的需求被文献 [117] 推广到算子的情形, 经典的概率论以及相关概念推广到非交换的量子概率论, 酉演化算子的累积量展开需要将经典的、可交换的累积量概念^[140]推广到非交换情形^[186], 经典的平滑估计理论在量子情形下需要被重新解释和定义, 等等. 历史上的许多事例都表明, 物理学中的重大需求有可能会促进数学分支的发展乃至新分支的诞生, 例如 Newton 为了研究运动学而创立了微积分; Dirac 在研究量子力学时提出了 Dirac δ 函数, 其重要应用后来促进了广义函数论的诞生; 量子场论与弦论中的对偶给数学带来大量启发. 因此, 希望本文既能对量子系统辨识与参数估计提供一个较系统性的综述从而促进该方向的发展与成熟, 又能体现其与数学的紧密联系与有机互动.

由于不同场景下的辨识和估计任务存在差异, 量子系统辨识与参数估计方向内部存在若干不同的子课题. 图 1 描述了量子系统辨识与参数估计的一个常见流程: 设某个感兴趣的量子系统处于初态 $\rho(0)$, 其经过时长为 T 的动力学演化后成为终态 $\rho(T)$, 通过对 $\rho(T)$ 进行量子测量提取信息, 最后经过经典计算机的数据处理得到对感兴趣物理量的估计值. 根据不同的任务, 图 1 的内容与诠释会相应调整: 量子度量学研究基于量子效应测量感兴趣的物理参数, 往往假设初态 $\rho(0)$ 已知, 未知参数包含于动力学演化过程中; 量子层析 (quantum tomography) 可认为是设置图 1 中的 T 为某个定值, 要求估计感兴趣的量子对象—量子态 (quantum state)、量子过程 (quantum process) 或探测器 (detector)—的全部参数; 量子滤波 (quantum filtering) 与图 1 有所不同, 前者测量的对象是感兴趣的系统所处的环境而非系统本身; 量子噪声谱学 (quantum noise spectroscopy) 假设初态 $\rho(0)$ 已知, 估计所处非 Markov 环境噪声的谱信息.

本文余下内容的安排如下. 量子度量学研究量子系统中参数估计的精度极限, 是量子系统一般性辨识与参数估计的基本问题, 因此首先在第 2 节加以介绍. 第 3 节起介绍常见估计任务及解决方案: 第 3 节介绍定常参数估计即量子层析的方法. 第 4 节介绍对重要时变参数估计的方法, 其中第 4.1 小节介绍量子滤波方法, 第 4.2 小节介绍量子噪声谱估计技术. 第 5 节总结全文并加以展望.

1.2 符号定义与基本知识

常用数学记号: $i = \sqrt{-1}$. $\mathbb{N}_+$ 为正整数集合. 单位矩阵/恒等算子记为 I . 张量积为 $\otimes$. d 维复/实向量空间为 $\mathbb{C}^d/\mathbb{R}^d$, $m \times n$ 维复/实数矩阵空间为 $\mathbb{C}^{m \times n}/\mathbb{R}^{m \times n}$. A^T 、 A^* 和 $A^\dagger$ 分别表示矩阵 A 的转置、共轭、共轭转置. 向量 a 的 2-范数和矩阵 A 的 Frobenius 范数分别记为 $\|a\|$ 和 $\|A\|$. $\mathcal{H}$ 代表 Hilbert 空间. 对于 $X \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, 取 $\mathcal{H}_1$ 上的偏迹结果记为 $\text{Tr}_1(X)$. 若对角矩阵 A 的主对角线组成向量 a , 定义 $A = \text{diag}(a)$. 变量 X 的估计值记为 $\hat{X}$. 对于半正定矩阵 $X_{d \times d} \geq 0$, 假设其特征分解为 $X = UPU^\dagger$, 定义 $\sqrt{X}$ 或 $X^{\frac{1}{2}}$ 为 $U \text{diag}(\sqrt{P_{11}}, \sqrt{P_{22}}, \dots, \sqrt{P_{dd}})U^\dagger$. $E(\cdot)$ 表示对所有可能的

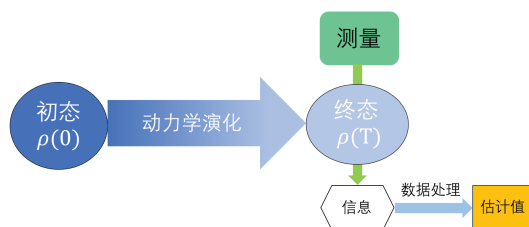


图 1 量子系统辨识与参数估计常见流程

测量结果的期望. $[A, B] = AB - BA$ 称为对易子 (commutator), $\{A, B\} = AB + BA$ 称为反对易子 (anti-commutator). 本文中 T 一般表示系统演化的终止时刻或进行测量的时刻. Pauli 矩阵为

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

一个封闭量子系统的状态可用其所属的 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 上的单位复向量 $|\psi\rangle$ 表示 (有限维时为列向量), 其演化动力学由 Schrödinger 方程

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

描述, 其中 H 是系统 Hamilton 量, 是 Hermite 算子, 且本文沿袭多数物理文献的习惯采用 $\hbar = 1$ 的原子单位制. 对于开放量子系统或者当系统状态不唯一确定时, 需要用密度算子 (density operator) ρ 描述系统状态, ρ 的数学要求为 Hermite 半正定及 $\text{Tr}(\rho) = 1$. 确定性的 ρ 称为纯态 (pure state), 有 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, 其中 $|\psi\rangle$ 与 $\langle\psi|$ 互为伴随, 此时也常不加区分地称呼 ρ 与 $|\psi\rangle$. 非纯态称为混态 (mixed state), 可以通过谱分解等方法用纯态表示出来, 形如 $\rho = \sum_i c_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, 其中 $c_i \in \mathbb{R}$ 且 $\sum_i c_i = 1$. 系统的纯度 (purity) 定义为 $\text{Tr}(\rho^2)$, 纯态的纯度等于 1, 混态的纯度小于 1. 混态的时间演化方程由酉算子 U (又称传播子 (propagator)) 决定:

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t), \quad (1.2)$$

其中当 H 不含时间 (独立于 t) 时有 $U(t) = e^{-iHt}$.

量子系统的信息可以通过测量环节被提取. 该环节的描述有几种等价但侧重点不同的方式, 其中较广泛的一种为正算子值测度 (positive operator-valued measure, POVM). 一组 POVM 元素是一个算子集合 $\{P_i\}_{i=1}^n$, 其中每个 P_i 都是 Hermite 半正定的, 且满足完备性约束 (completeness constraint) $\sum_{i=1}^n P_i = I$. 每次测量消耗量子态的一个物理拷贝, 随机得到 n 个结果中的一个. 根据 Born 定则, 得到第 i 个结果的概率是

$$p_i = \text{Tr}(P_i\rho). \quad (1.3)$$

考虑到完备性约束, 从而有 $\sum_{i=1}^n p_i = 1$. 常用 N 表示消耗的量子态拷贝 (也称为资源) 的总数, 记其中第 i 个结果发生了 N_i 次, 则实验上可用 $\hat{p}_i = N_i/N$ 作为对 p_i 的估计值. 定义测量误差为 $e_i = p_i - \hat{p}_i$.

量子信息科学利用量子系统的状态表示信息. 类似于经典信息的基本单元“比特”是二进制中的一位, 人们常用二能级量子系统的两个正交态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 作为量子信息的基本单元, 这样的系统被称为“量子比特” (qubit). 在没有歧义时, 本文也常将“量子比特”简称为“比特”. 与经典比特不同的是, 量子比特还可以处于 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的线性组合状态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ($\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$), 这被称为叠加态 (superposition state).

常记量子系统维数为 d , 则所有单比特量子态 ρ ($d = 2$) 与所有满足 $\|\vec{r}\| \leq 1$ 的 $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$ 按如下方式构成一一对应:

$$\rho = \frac{I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}}{2}, \quad (1.4)$$

其中采用了 $\vec{\sigma} \triangleq (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 的形式记法. 这被称为 Bloch 表象 (representation). 向量 $\vec{r}$ 称为 Bloch 向量, 构成的 $\mathbb{R}^3$ 中的单位球称为 Bloch 球. 纯态和混态分别对应球的表面和内部, 最大混态 $\rho = I/2$ 对

应球心. 若定义单比特旋转

$$R_{\vec{n}}(\theta) \triangleq \exp\left(-i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}\right) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z), \quad (1.5)$$

其中 $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 为 $\mathbb{R}^3$ 中任意单位向量, 则 $U = R_{\vec{n}}(\theta)$ 的作用效果在 Bloch 表象下为将 Bloch 向量 $\vec{r}$ 绕 Bloch 球的 $\vec{n}$ 轴旋转 θ 角.

2 量子度量学

对重要物理量的估计在科学与技术的诸多领域都发挥着基础作用. 量子度量学 (又称量子计量学、量子精密测量) 研究基于量子效应设计测量方案估计物理参数. 在合适的条件下, 通过合理利用纠缠 (entanglement) 和压缩 (squeezing) 等效应, 可能给出比经典方案更高精度/灵敏度的估计结果. 该方向已经存在较多综述, 各有侧重. 故本节主要对基本内容作简要介绍, 更具体、深入的内容可见文中相应索引的综述.

2.1 从经典精度极限到量子精度极限

经典参数估计的一个基本任务是基于随机变量 X 的 N 个独立同分布 (服从概率密度 $p(x|\theta)$) 的样本估计其中感兴趣的参数 θ . 定义单个样本的经典 Fisher 信息 (假设其存在) 为

$$I(\theta) \triangleq \mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial \log p(x|\theta)}{\partial \theta}\right)^2\right]. \quad (2.1)$$

假设支撑 $\{x | p(x|\theta) > 0\}$ 不依赖于 θ , 且对 θ 的偏导可以与积分 $\int p(x|\theta)dx$ 交换次序. 则经典的 Cramér-Rao 不等式^[62, 203] 给出了估计精度的下界 (下文简记为 CR 下界):

定理 2.1^[174] 在上述假设下, 任何无偏估计 $\hat{\theta}$ 的方差的下界是总 Fisher 信息的倒数:

$$\text{Var}(\hat{\theta}) \geq \frac{1}{NI(\theta)}. \quad (2.2)$$

定理 2.1 的证明基础为 Cauchy 不等式, 右侧分母的 N 来自于 Fisher 信息的加性, 简短证明可参见文献 [36, 293]. CR 下界可以被极大似然估计 (当其存在时) 渐近达到^[88, 89].

对于多参数情形, Fisher 信息取矩阵形式

$$I_{jk}(\theta) \triangleq \mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial \log p(x|\theta)}{\partial \theta_j}\right)\left(\frac{\partial \log p(x|\theta)}{\partial \theta_k}\right)\right]. \quad (2.3)$$

相应地, CR 界成为矩阵不等式

$$\text{Cov}(\hat{\theta}) \geq \frac{1}{N}I^{-1}(\theta), \quad (2.4)$$

其中 $\text{Cov}(\hat{\theta})$ 为协方差矩阵.

量子参数估计的典型流程可以在图 1 的基础上进一步解释为: 制备一个量子系统 $\rho(0)$ 作为探针 (probe), 用探针与含 θ 的系统 (可认为探针经历的量子过程依赖于 θ) 相互作用, 测量探针的终态 $\rho_\theta(T)$, 处理数据以得到估计值 $\hat{\theta}$ ^[100]. 从而 x 表示可能的测量结果, N 等于可区分的子系统个数, 即探针系统的拷贝数. 对于每次测量相互独立的无偏估计场景, 直接应用 (2.2) 即得到

$$\min \sigma(\hat{\theta}) \sim \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (2.5)$$

其中 $\sigma(\hat{\theta})$ 为标准差, 称为标准量子极限 (standard quantum limit) 或散粒噪声极限 (shot noise limit). 然而, 利用纠缠等量子效应, 可能打破“测量相互独立”的前提, 例如, 制备系统的 N 个拷贝处于纠缠态, 则对其测量得到的结果一般不是严格相互独立的^[100]. 因此, 在合适条件下可能达到更优的标度律 (scaling)

$$\sigma(\hat{\theta}) \sim \frac{1}{N}, \quad (2.6)$$

称为 Heisenberg 极限^[100, 120, 281]. (2.6) 比 (2.5) 在标度律上存在 $\frac{1}{\sqrt{N}}$ 的改进, 体现了量子测量方案相比经典方案的优势, 成为量子度量学的一个重要研究方向^[101]. 更一般地, 为了探明量子测量方案究竟能比经典方案提升多少精度、实现精度提升需要达到哪些条件, 需要严格刻画量子测量方案的精度极限. 一个自然的思路是, 将经典测量的精度极限刻画工具 CR 下界推广到量子测量的情形, 这即为本节剩余部分的主要内容.

2.2 量子单参数估计

我们希望将 CR 下界 (2.2) 推广到估计量子系统中单个参数 θ 的情形. 注意到在量子系统的测量中, $p(x | \theta) = \text{Tr}[P(x)\rho(\theta)]$ 依赖于具体的 POVM 元素 $P(x)$ 的选取, 从而事实上有 $I(\theta) = I(P(x), \theta)$. 因此, (2.2) 在量子系统中应对 $P(x)$ 优化. 定义量子 Fisher 信息为经典 Fisher 信息在所有可能的 POVM 中的最大值

$$I_Q(\theta) \triangleq \max_{P(x)} I(P(x), \theta), \quad (2.7)$$

即可得到 (2.2) 的量子版本 CR 界

$$\text{Var}(\hat{\theta}) \geq \frac{1}{NI_Q(\theta)}. \quad (2.8)$$

然而, 依据定义式 (2.7) 可能并不容易由给定的 $\rho(\theta)$ 计算出 $I_Q(\theta)$ 的显式结果. 常见的与其等价的定义是^[117]

$$I_Q(\theta) = \text{Tr}[\rho(\theta)L(\theta)^2], \quad (2.9)$$

其中 $L(\theta)$ 是 Hermite 算子, 称为对称对数导数 (symmetric logarithmic derivative, SLD), 满足

$$\frac{\partial \rho(\theta)}{\partial \theta} = \frac{1}{2}[\rho(\theta)L(\theta) + L(\theta)\rho(\theta)]. \quad (2.10)$$

对 $I_Q(\theta) \geq I(P(x), \theta)$ 的简短证明可参见文献 [293, (5.4)]. 分析取等条件可知, 最优测量取 $L(\theta)$ 为可观测量 (observable), 即用 $L(\theta)$ 的特征向量进行投影测量. 如果进一步采用极大似然估计, 则可渐近达到量子 CR 界.

以单参数相位估计 (phase estimation) 问题为例, 量子 Fisher 信息给出了精度刻画的条件: 设 N 量子比特系统演化方程为 $\rho_{\text{out}}(\theta) = e^{i\theta J_{\vec{n}}} \rho_{\text{in}} e^{-i\theta J_{\vec{n}}}$, 其中, $J_{\vec{n}} = \sum_{k=x,y,z} n_k J_k$, $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$ 是单位向量, 角动量分量 $J_k = \sum_{n=1}^N \sigma_k^{(n)}$, 这里 $\sigma_k^{(n)}$ 是第 n 个量子比特的 Pauli 矩阵 k . 文献 [191] 证明了 $I_Q(\theta) > N$ 是系统存在纠缠的充分条件, 也是该纠缠在量子度量意义下有用 (即相位估计误差小于标准量子极限) 的充要条件, 相关综述可参见文献 [192]. 此外, 考虑到很多高度纠缠的态在目前实验技术下不容易制备, 一个方向是, 研究非纠缠的精度提升, 其理论基础在于纠缠未必是突破标准量子极限的必要条

件: 通过考虑混态、考虑全同粒子、扩展 Hamilton 量的结构、扩展参数编码方式等方法打破标准量子极限的应用条件, 可以在合适场景下不依赖于纠缠就获得参数估计精度的突破, 相关综述可参见文献 [36].

通过引入非线性或非局域的 Hamilton 量可能实现超越 Heisenberg 标度律的量子度量方案, 例如, 当 Hamilton 量取 k 体耦合形式时, 单参数估计精度标度律可以达到 $1/N^k$ [29]; 当耦合项指数多时甚至可以达到 2^{-N} 的精度标度律 [207]. 但相关结果是否是严格意义上“超越 Heisenberg 的”仍然存在一定争议 [113, 296], 相关研究有待进一步发展、澄清. 现有的涉及这方面的综述可参见文献 [36, 101] 等.

除了在量子单参数估计中的应用以外, 量子 Fisher 信息与 Hamilton 量的方差 [153]、量子态几何、量子信道 [18]、量子相变 (quantum phase transition)、纠缠目击 (entanglement witness) 和纠缠检测 (entanglement detection) [143] 等概念也有密切联系, 相关综述可参见文献 [145, 146, 231, 259] 等. 量子 Fisher 信息的性质总结可参见文献 [204, 231].

2.3 量子多参数估计

同时估计量子系统中的多个参数时, 仿照 (2.7) 推广 (2.3) 的方式显然不唯一, 故存在多种方式定义量子 Fisher 信息矩阵并得到相应的量子 CR 界, 相关介绍可参见文献 [145]. 这里沿用第 2.2 小节的思路, 主要介绍基于 SLD 定义的量子 Fisher 信息矩阵, 其元素为

$$\mathcal{I}_{jk}(\theta) \triangleq \frac{1}{2} \text{Tr}[\rho(\theta)\{L_j, L_k\}], \quad (2.11)$$

其中 L_j 是参数 θ_j 的 SLD, 即满足

$$\frac{\partial \rho(\theta)}{\partial \theta_j} = \frac{1}{2} [\rho(\theta)L_j + L_j\rho(\theta)]. \quad (2.12)$$

相应的量子 CR 界可以写为

$$\text{Cov}(\hat{\theta}) \geq \frac{1}{N} \mathcal{I}^{-1}(\theta). \quad (2.13)$$

在单参数的情形, (2.13) 退化成 (2.8), 可以取等号. 但在多参数的情形, 若要取等号, 需要对不同的 L_j 的特征向量进行投影测量, 其在一般情形下是不对易的, 故实际不能同时测量. 因此, 多参数的量子 CR 界 (2.13) 一般不可达. 可达性的具体综述可参见文献 [145, 第 3.1.2 小节].

量子 Fisher 信息矩阵有一系列常见性质及丰富的计算技巧. 与量子 Fisher 信息类似, 量子 Fisher 信息矩阵也在度量学以外的诸多领域如量子力学几何、热力学和量子动力学等建立了广泛关联. 上述内容总结可参见综述文献 [145].

由于量子系统不同参数最优测量的不相容性 (incompatibility), 多参数估计存在量子 CR 界以外的多种下界及分析工具, 如 Bayes 方法、Holevo 界和量子局域渐近正态 (quantum local asymptotic normality) 等, 相关内容可参见综述文献 [70]. 这也体现了量子参数估计与经典估计的重要区别. 总体而言, 多参数估计存在许多未解决的开放问题, 是值得深入研究的重要方向, 相关综述可参见文献 [70, 145, 215, 227].

2.4 应用与展望

量子度量学最著名的应用之一是使用非经典光提升基于激光干涉的引力波观测仪 (laser interferometer gravitational-wave observatory, LIGO) 的性能 [2, 27, 51, 109, 144, 212, 237]. 此外, 量子度量学还

在量子信息的众多方向得到应用与发展^[146], 包括量子相位估计 (是很多量子计算算法中的重要环节)^[11, 119, 180]、量子传感网络^[198]、量子测温 (quantum thermometry)^[61]、量子磁强计 (quantum magnetometer)^[35, 260]、量子测距 (quantum ranging)^[127, 196, 294]、量子光谱学 (quantum spectroscopy)^[44, 164]、量子成像 (quantum imaging)^[49, 135, 151, 170, 232, 236]、量子陀螺仪 (quantum gyroscope)^[79, 112]、原子钟 (atomic clock)^[42, 72, 150] 和生物学^[228] 等. 涉及部分应用的综述可参见文献 [69, 135, 192].

要将量子度量学发展成一个全面、成熟的方向, 还有许多实际问题需要解决. 首先, 在根据量子 CR 界给出对未知参数最优测量的方案之前, 还需要完成一系列具体优化问题, 包括系统初态的优化、动力学过程的优化以及测量方案的优化, 相关总结可参见综述文献 [146]. 其次, 量子度量所需要的量子态并不总易于在实验室制备, 相关进展可见各类物理系统的综述, 如原子系统^[192]、冷原子^[126] 和光学系统^[71, 80, 81, 193] 等. 最后, 噪声/退相干 (decoherence) 是量子度量学走向实际的显著阻碍, 例如, 即使是强度一般的 Markov 噪声也可以将高度纠缠态能达到的 Heisenberg 极限在标度律上退化成标准量子极限^[83, 128, 136]. 虽然含噪系统下的量子度量学已经取得了一定研究成果, 但一般性的噪声对精度极限和最优测量方案等的影响仍然是重要的开放问题, 有待发展研究. 现有研究的相关总结可参见文献 [71, 82, 101, 146, 192, 215, 231].

3 量子层析

在过去的几十年中, 各种量子技术取得了显著的进步, 包括量子计算、量子通信、量子传感和量子控制等. 在这些应用中, 一个基本任务是设计有效的估计和辨识算法, 以获取感兴趣的量子系统的完整信息, 这个过程称为量子层析或量子系统辨识 (quantum system identification)^[75, 97]. 图 1 描述了进行量子层析实验的典型流程, 并进而根据图中未知组件的不同而对应不同的量子层析任务: (i) 量子态层析 (quantum state tomography), 在测量算子与测量结果已知的场景下, 目标是估计未知的量子态 (常不显含时间, 可认为感兴趣的是 $\rho(T)$); (ii) 量子探测器层析 (quantum detector tomography), 利用已知的量子态和测量结果识别和校准量子测量设备; (iii) 量子过程层析 (quantum process tomography), 基于已知的初态 $\rho(0)$ 、测量算子与测量结果, 辨识未知的量子动力学演化过程. 这三类层析任务的具体定义详见第 3.1–3.3 小节, 并且它们实际上与量子力学的前三条公设有重要联系. 量子力学的第一条公设是量子系统被密度矩阵 ρ 完全刻画, 而量子态层析就是在重构 ρ . 量子力学的第二条公设是 Schrödinger 方程, 其描述的是封闭的量子系统, 系统演化由 Hamilton 量 H 决定, 此时量子过程层析退化为辨识 Hamilton 量 H . 如果系统与环境还有耦合, 可以用一般的量子过程 $\mathcal{E}$ 来描述系统动态, 量子过程层析就是在重构 $\mathcal{E}$. 量子力学的第三条公设是测量公设, 用量子探测器来对量子系统进行测量, 探测器在数学上对应一组 POVM $\{P_i\}_{i=1}^n$, 量子探测器层析就是重构 $\{P_i\}_{i=1}^n$. 因此, 这三类层析 “是完全确定一个 (量子测量) 实验所必需的三元组”^[152], 表明量子层析是帮助理解、刻画和改良量子技术的重要工具.

总的来说, 量子层析可以分为两类. 一类是完整层析, 即重构出整个量子态/量子过程/量子探测器, 这类方法可以保证层析结果的可靠性与普适性, 但是因为要重构所有信息, 会面临指数爆炸的问题^[97]. 指数爆炸指的是随着量子系统维数的增加, 实验所消耗的资源数随量子比特个数增长是指数增加的, 因此这就限制了对高维量子系统的完整层析. 另外一类是部分层析, 即只重构出量子态/量子过程/量子探测器的部分信息, 这类方法可以减少甚至避免指数爆炸的问题, 代价是通常只针对一些特殊的量子对象有效^[97]. 对于一般的量子对象, 无法保证有效性. 本节将介绍几类层析问题的数学描述和

常见的完整层析算法, 同时也简要概述一些部分层析算法.

3.1 量子态层析

3.1.1 概述

“层析”一词来自于经典的断层扫描技术. 在量子科技中, 根据已知的 POVM, 从测量数据中推断未知量子态 ρ 的过程称为量子态层析^[184, 245], 它是完整刻画量子系统状态的基本技术, 对评估量子实验技术水平和硬件性能至关重要, 有利于推动量子信息技术的发展; 同时精确学习量子态也是研究基础物理学的关键需求. 因此, 量子态层析获得了广大物理学家的关注.

本文关注的是有限维的量子层析, 如多比特或有限多能级量子系统. 对于连续变量量子系统的层析方法, 如用于重建光学模式状态的 Wigner 层析, 可参见文献^[154, 184].

对于态层析任务, 需要完备的测量数据, 使得从数据中可以重构出唯一的满足约束的估计态 $\hat{\rho}$ (参见文献^[175]). 为此, 通常需要在许多不同的探测器下对 ρ 的多个拷贝进行测量. 一组探测器对应一个 POVM 集合, 一组或多组探测器整体构成一族完备的测量. 假设有 J 组探测器, 每组探测器有 n_j 个 POVM 元素 $\{P_{i,j}\}_{i=1}^{n_j}$, 则总的测量算符个数为 $L = \sum_{j=1}^J n_j$, 而且对于 $1 \leq j \leq J$ 均有

$$P_{1,j} + P_{2,j} + \cdots + P_{n_j,j} = I_d. \quad (3.1)$$

这是对每组探测器的完备性约束. 为简便起见, 重新定义 $\{P_i\}_{i=1}^L$ 为 $P_{i+\sum_{q=1}^{j-1} n_q} \leftarrow P_{i,j}$. 例如, 单比特的 Cube 测量^[66] 为 $\{\frac{I \pm \sigma_x}{2}, \frac{I \pm \sigma_y}{2}, \frac{I \pm \sigma_z}{2}\}$, 包含的 3 组探测器为 $\frac{I \pm \sigma_x}{2}$ 、 $\frac{I \pm \sigma_y}{2}$ 和 $\frac{I \pm \sigma_z}{2}$, 总的测量算符个数为 $L = 6$. 现在有若干完备的测量算符 $\{P_i\}_{i=1}^L$, 根据 Born 定则, 理想的测量概率值是

$$p_i = \text{Tr}(P_i \rho). \quad (3.2)$$

实验上, 标准的量子态层析过程如下:

- 准备未知量子态 ρ 的 N 个独立、相同的拷贝;
- 分别用 J 组探测器进行测量, 每组消耗 N/J 个拷贝 (为简单起见, 假设拷贝数均分至每组);
- 对于测量算符 P_i , 记录其对应结果被观测到的次数为 m_i .

那么 $\hat{p}_i = \frac{m_i}{N/J}$ 就是 p_i 的估计值, 定义 $e_i \triangleq \hat{p}_i - p_i$ 为实验上的测量误差. 因为实验上测量是多次测量取平均值, 所以由中心极限定理可知, 随着 N 的增加, e_i 会收敛到均值为 0、方差为 $\frac{p_i - p_i^2}{N/J}$ 的正态分布^[199].

量子态层析就是用这些实验测量数据 $\{\hat{p}_i\}_{i=1}^L$ 并结合 $\{P_i\}_{i=1}^L$ 的信息来重构出未知的量子态 ρ , 一般可以从最优化的角度建模成优化问题. 不同的层析算法可能对优化问题的目标函数的形式有不同的要求, 求解算法也不尽相同^[60]. 下面介绍 3 类常见的完整量子态层析算法: 凸优化、极大似然估计 (maximum likelihood estimation, MLE) 和最小二乘估计.

3.1.2 凸优化估计方法

量子态层析可以表述为如下凸优化问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^L [\hat{p}_i - \text{Tr}(\rho P_i)]^2 \\ \text{s.t.} \quad & \text{Tr}(\rho) = 1, \quad \rho^\dagger = \rho, \quad \rho \geq 0. \end{aligned} \quad (3.3)$$

该凸优化问题可以用很多常见的凸优化工具箱进行求解, 如 CVX^[107] 和 YALMIP (yet another LMI parser)^[147] 等. 凸优化的优点是得到的局部最优解也是全局最优的^[33], 而且也满足所有的物理约束, 即估计值 $\hat{\rho}$ 一定是 Hermite 半正定且迹为 1; 缺点是很难给出解析的误差分析和计算复杂度刻画, 而且求解过程一般需要迭代求解, 所以实际求解耗时常高于非迭代类算法. (3.3) 的损失函数是基于 L_2 范数的, 也可以替换成基于 L_1 范数, 其仍然保持为一个凸优化问题. 此处可见凸优化方法的另一个不足: 求解依赖于损失函数的选择, 不同的损失函数得到的解可能不同, 难以给出不同的损失函数得到的解的物理含义.

3.1.3 极大似然估计

截至目前, 物理学家最常用的方法可能是极大似然估计, 原因是其给出的态估计值 $\hat{\rho}_{\text{MLE}}$ 具备明显的物理含义: 在所有满足物理约束的估计值 $\hat{\rho}$ 中, $\hat{\rho}_{\text{MLE}}$ 是生成当前测量数据的可能性最大的态. 具体而言, 注意到似然函数为 $\prod_{i=1}^L [\text{Tr}(\rho P_i)]^{m_i}$, 定义如下对数似然函数^[124, 184]:

$$\mathcal{L}(\rho) = \sum_{i=1}^L \hat{p}_i \ln \text{Tr}(\rho P_i). \quad (3.4)$$

则极大似然的估计值为

$$\hat{\rho}_{\text{MLE}} = \arg \max_{\rho} \sum_{i=1}^L \hat{p}_i \ln \text{Tr}(\rho P_i). \quad (3.5)$$

文献 [124] 提出了如下的迭代求解算法:

- (1) 设定一个满足物理约束的初始值, 如 $\rho^{(0)} = I/d$. 令 $k = 0$.
- (2) 在第 k 步, 计算

$$R^{(k)} = \sum_{i=1}^L \frac{\hat{p}_i P_i}{\text{Tr}[\rho^{(k)} P_i]}. \quad (3.6)$$

- (3) 在第 $k+1$ 步, 更新估计值为

$$\rho^{(k+1)} = \frac{R^{(k)} \rho^{(k)} R^{(k)}}{\text{Tr}[R^{(k)} \rho^{(k)} R^{(k)}]}. \quad (3.7)$$

- (4) 令 $k = k+1$. 重复步骤 (2) 和 (3), 直到误差 $\|\rho^{(k)} - \rho^{(k-1)}\| \leq \epsilon$, 其中 $\epsilon > 0$ 是预先设定的误差阈值. 最终给出 $\hat{\rho}_{\text{MLE}} = \rho^{(k)}$.

极大似然估计的优点是随着资源量增长可以逼近 CR 下界. 但是类似凸优化, 同样难以解析地分析误差与计算复杂度.

3.1.4 最小二乘估计

文献 [199] 提出了基于最小二乘的量子层析, 该算法是解析的, 也称为线性回归估计 (linear regression estimation, LRE) 方法. 假设 $\{\Omega_i\}_{i=0}^{d^2-1}$ 是 d 维 Hilbert 空间的一组正交基, 满足 $\text{Tr}(\Omega_i^\dagger \Omega_j) = \delta_{ij}$, $\Omega_i = \Omega_i^\dagger$, 其中除了 $\Omega_0 = I/\sqrt{d}$, 其他矩阵满足 $\text{Tr}(\Omega_i) = 0$. 则量子态在这组正交基上的展开为

$$\rho = \frac{I}{d} + \sum_{i=1}^{d^2-1} \theta_i \Omega_i, \quad (3.8)$$

其中 $\theta_i = \text{Tr}(\rho\Omega_i)$ 为实数. 定义实向量 $\theta \triangleq (\theta_1, \dots, \theta_{d^2-1})^T$. 类似地, 测量算符在正交基上的展开为

$$P_i = \sum_{k=0}^{d^2-1} \phi_k^i \Omega_k, \quad (3.9)$$

其中 $\phi_k^i = \text{Tr}(P_i \Omega_k)$ 为实数. 定义实向量 $\Phi_i \triangleq (\phi_1^i, \dots, \phi_{d^2-1}^i)^T$. 考虑测量误差 e_i , 可以得到线性回归方程

$$\hat{p}_i = \text{Tr}(\rho P_i) + e_i = \frac{1}{d} \text{Tr}(P_i) + \Phi_i^T \theta + e_i. \quad (3.10)$$

定义 $\hat{y} \triangleq [\hat{p}_1 - \frac{1}{d} \text{Tr}(P_1), \dots, \hat{p}_L - \frac{1}{d} \text{Tr}(P_L)]^T$, $\Phi \triangleq [\Phi_1, \dots, \Phi_L]^T$, $e \triangleq [e_1, \dots, e_L]^T$, 可得完整的线性方程

$$\hat{y} = \Phi \theta + e. \quad (3.11)$$

(3.11) 的最小二乘解为

$$\hat{\theta}^{\text{LS}} = (\Phi^T \Phi)^{-1} \Phi^T y, \quad (3.12)$$

并具备以下两个性质:

- $\hat{\theta}^{\text{LS}}$ 是无偏估计, 即 $E(\hat{\theta}^{\text{LS}}) = \theta$;
- 均方误差 $E(\hat{\theta}^{\text{LS}} - \theta)^T (\hat{\theta}^{\text{LS}} - \theta)$ 为

$$\frac{M}{N} \text{Tr}[(\Phi^T \Phi)^{-1} \Phi^T \mathcal{O} \Phi (\Phi^T \Phi)^{-1}], \quad (3.13)$$

其中 $\mathcal{O} = \text{diag}(p_1 - p_1^2, \dots, p_L - p_L^2)$.

利用最小二乘解 $\hat{\theta}^{\text{LS}}$, 可以得出伪估计态 $\tilde{\rho} = \frac{I}{d} + \sum_{i=1}^{d^2-1} \hat{\theta}_i \Omega_i$. 最小二乘的优点是, 该算法是解析的, 其计算复杂度是 $O(Ld^2)$ [199], 其中 $L \geq d^2$. 因为 $p_i - p_i^2 \leq \frac{1}{4}$, 所以还可以给出误差上界

$$E\|\tilde{\rho} - \rho\|^2 \leq \frac{J}{4N} \text{Tr}(\Phi^T \Phi)^{-1}. \quad (3.14)$$

估计值 $\tilde{\rho}$ 满足 $\text{Tr}(\tilde{\rho}) = 1$ 和 $\tilde{\rho}^\dagger = \tilde{\rho}$, 但可能含有负的特征值, 不满足半正定的约束, 因此被称为伪态, 还需要被校正. 文献 [218] 提出了一种快速校正的算法. 其中的目标是找到一个物理估计 $\hat{\rho}$ 最小化 $\|\tilde{\rho} - \hat{\rho}\|$. 假设 $\tilde{\rho}$ 的特征分解为

$$\tilde{\rho} = \tilde{U} \text{diag}(\tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_d) \tilde{U}^\dagger,$$

其中 $\tilde{\lambda}_1 \geq \dots \geq \tilde{\lambda}_d$ 且 $\sum_{i=1}^d \tilde{\lambda}_i = 1$. 文献 [218] 指出, 我们要找到最大的 k , $1 \leq k \leq d$, 使得

$$\tilde{\lambda}_k + \frac{\sum_{i=k+1}^d \tilde{\lambda}_i}{k} \geq 0, \quad \tilde{\lambda}_{k+1} + \frac{\sum_{i=k+2}^d \tilde{\lambda}_i}{k+1} < 0. \quad (3.15)$$

令

$$\hat{\lambda}_j = \begin{cases} \tilde{\lambda}_j + \sum_{i=k+1}^d \frac{\tilde{\lambda}_i}{k}, & 1 \leq j \leq k, \\ 0, & k+1 \leq j \leq d, \end{cases} \quad (3.16)$$

则最后的估计值为

$$\hat{\rho} = \tilde{U} \text{diag}(\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_d) \tilde{U}^\dagger.$$

该校正算法的计算复杂度为 $O(d^3)$ [218], 因此最小二乘估计加上校正算法, 计算复杂度仍然是 $O(Ld^2)$. 基于这套组合方案, 文献 [122] 在 4 小时内完整重构了一个 14 量子比特态.

3.1.5 典型态层析算法总结

本小节从层析精度的角度分析第 3.1.2–3.1.4 小节的几个典型算法并加以总结. 为了衡量估计结果的精度, 除了均方误差外, 常用的度量还有迹距离 (trace distance)

$$D(\hat{\rho}, \rho) = \frac{1}{2} \text{Tr}[\sqrt{(\hat{\rho} - \rho)^\dagger (\hat{\rho} - \rho)}] \quad (3.17)$$

和保真度 (fidelity)

$$F(\hat{\rho}, \rho) = (\text{Tr} \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}} \rho \sqrt{\hat{\rho}}})^2, \quad (3.18)$$

对应的非保真度 (infidelity) 定义为 $1 - F(\hat{\rho}, \rho)$. 对完整态层析估计误差, 可以证明, 迹距离、均方误差和非保真度的最优收敛率均为 $O(1/N)$ [293], N 是所有的拷贝数. 对于以上介绍的 3 种算法, 迹距离和均方误差对任意的量子态都可以达到最优收敛率 $O(1/N)$. 但是, 如果对于缺秩的量子态采用这些算法, 即 $\text{rank}(\rho) < d$, 非保真度的收敛率一般为 $O(1/\sqrt{N})$, 则达不到最优的收敛率 $O(1/N)$. 为了达到最优的收敛率, 文献 [158] 针对单比特系统, 提出了自适应的量子态层析方案, 动态改变测量算符, 从理论和实验上验证了结论. 随后, 自适应的量子态层析被扩展到两比特 [139, 200] 和多能级量子系统 [190]. 基于 Bayes 的优化, 文献 [129, 139] 也提出了自适应的层析方案, 数值和实验验证可以达到最优收敛率 $O(1/N)$. 总的来说, 目前对于自适应的量子态层析还缺少完整的描述, 即给出达到非保真度最优收敛率 $O(1/N)$ 的充要条件, 这一方向值得进一步探索.

在态层析的最高精度值方面, 由于涉及量子多参数估计问题 (参见第 2.3 小节), 其中一般情形的精度估计极限目前尚未解决, 因此态层析的精度极限问题一般也是未解决的状态. 特殊的是, 单量子比特模型已被完全解决 [99, 115, 123, 293], 可由 Gill-Massar 不等式 [99] 推导出, 但多比特的一般情形仍然是开放问题.

3.1.6 高效态层析算法

本小节前述的讨论主要针对完整的量子态层析. 对于一些特殊的量子态, 很多高效的层析算法被提出和研究. 针对低秩的量子态, 文献 [92, 108] 提出了压缩感知 (compressed/compressive sensing) 的方法, 也是基于凸优化来求解. 文献 [85] 基于随机逼近, 提出了自引导量子态层析 (self-guided quantum tomography), 计算和空间复杂度都远低于完整层析, 实验上也证明了有效性 [56]. 该方法主要针对纯态, 文献 [202] 利用此方法重构了维数为 20 的量子态, 保真度达到 0.991. 许多常见 Hamilton 量的基态, 可以用张量网络 (tensor network) 近似地表示, 其未知参数数量与比特数为线性关系, 对这类特殊的量子态, 文献 [63, 141] 提出了高效的算法, 并分别在理论和实验上验证了算法的有效性. 如果对 ρ 的测量是随机进行的, 并且这些测量满足一个固定的分布, 则之后的测量结果可以被学习到. 基于此, 文献 [1, 13, 125] 提出了阴影层析 (shadow tomography), 只需要 $O(\log K)$ 次测量, 就能对 K 个观测量进行高概率的准确预测, 而且测量次数与系统的维数无关, 是一种非常高效的部分层析算法. 随着机器学习与神经网络技术的发展, 相关技术如多层神经网络 [155, 156, 182]、受限 Boltzmann 机 [48, 230]、对抗神经网络 [4] 等也被应用到量子态层析中.

3.2 量子过程层析

固定演化时长, d 维量子系统的动态演化可以用一个完全正定线性映射 $\mathcal{E}$ 来描述, 即如果输入量

子态 ρ^{in} , 则输出量子态为 $\rho^{\text{out}} = \mathcal{E}(\rho^{\text{in}})$. 在 Kraus 表象下, 有 (参见文献 [175])

$$\rho^{\text{out}} = \mathcal{E}(\rho^{\text{in}}) = \sum_{i=1}^{d^2} \mathcal{A}_i \rho^{\text{in}} \mathcal{A}_i^\dagger, \quad (3.19)$$

其中 $\mathcal{A}_i \in \mathbb{C}^{d \times d}$ 称为 Kraus 算符, 它们满足

$$\sum_{i=1}^{d^2} \mathcal{A}_i^\dagger \mathcal{A}_i \leq I_d. \quad (3.20)$$

取等号时, 称这个量子过程是保迹的, 否则称为非保迹的. 通过选择 $\mathbb{C}^{d \times d}$ 的一组完备基 $\{E_i\}_{i=1}^{d^2}$, 可以将 $\mathcal{A}_i$ 在这组基下面展开

$$\mathcal{A}_i = \sum_j q_{ij} E_j, \quad (3.21)$$

则

$$\mathcal{E}(\rho^{\text{in}}) = \sum_{j,k=1}^{d^2} E_j \rho^{\text{in}} E_k^\dagger x_{jk}, \quad (3.22)$$

其中 $x_{jk} = \sum_i q_{ij} q_{ik}^*$. 定义矩阵 $Q = [q_{ij}]$ 和 $X = [x_{ij}]$, 则

$$X = Q^T Q^*, \quad (3.23)$$

它被称为量子过程矩阵, 是一个半正定的 Hermite 矩阵. 过程矩阵 X 和 $\mathcal{E}$ 是一一对应的, 估计或辨识 $\mathcal{E}$ 就是重构 X [175]. 如果将 $\{E_i\}$ 选为一组标准正交基 $\{|j\rangle\langle k|\}_{1 \leq j,k \leq d}$, 则约束会变为 $\text{Tr}_1(X) \leq I_d$, 且对于保迹的过程, 有 $\text{Tr}_1(X) = I_d$ [249].

量子过程层析有 3 种主流的框架 [168], 分别是标准量子过程层析 (standard quantum process tomography) [134, 175, 224, 249]、辅助系统协助量子过程层析 (ancilla-assisted quantum process tomography) [9] 和量子动力学直接层析 (direct characterization of quantum dynamics) [166, 167, 254], 下面主要介绍前两种框架.

3.2.1 标准量子过程层析

为估计 $\mathcal{H}^d$ 上的量子过程, 在标准量子过程层析的框架中, 输入 $\mathcal{H}^d$ 上不同的量子态, 然后对对应的输出态作量子态层析, 利用输入输出量子态的关系, 实现对过程矩阵 X 的估计. 选择一组 $\mathbb{C}^{d \times d}$ 的完备基 $\{\sigma_i\}_{i=1}^{d^2}$, 设所有的输入态为 $\{\rho_m^{\text{in}}\}_{m=1}^{d^2}$, 将输出态在这组基上面展开为

$$\rho_m^{\text{out}} = \mathcal{E}(\rho_m^{\text{in}}) = \sum_{n=1}^{d^2} \alpha_{mn} \sigma_n. \quad (3.24)$$

定义 β_{mn}^{jk} 满足

$$\sigma_j \rho_m \sigma_k^\dagger = \sum_{n=1}^{d^2} \beta_{mn}^{jk} \sigma_n. \quad (3.25)$$

因为 $\{\sigma_i\}_{i=1}^{d^2}$ 是线性独立的, 所以有

$$\sum_{j,k=1}^{d^2} \beta_{mn}^{jk} x_{jk} = \alpha_{mn}. \quad (3.26)$$

因此, 为了保证得到唯一的估计值, 需要这 d^2 个输入态是线性无关的. 定义矩阵 $A_{mn} \triangleq \alpha_{mn}$ 以及一个 $d^4 \times d^4$ 的矩阵 $B \triangleq [\bar{B}_{11}^T, \bar{B}_{21}^T, \dots, \bar{B}_{d^2 1}^T, \bar{B}_{12}^T, \bar{B}_{22}^T, \dots, \bar{B}_{d^2 d^2}^T]^T$, 其中 $\bar{B}_{jk} \triangleq [\beta_{jk}^{11}, \beta_{jk}^{21}, \dots, \beta_{jk}^{d^2 1}, \beta_{jk}^{12}, \beta_{jk}^{22}, \dots, \beta_{jk}^{d^2 d^2}]$. 引入向量化函数 $\text{vec}(\cdot)$, 将一个矩阵 $A_{m \times n} = [\alpha_{ij}]$ 转化为向量

$$\text{vec}(A_{m \times n}) = [a_{11}, a_{21}, \dots, a_{m1}, a_{12}, \dots, a_{m2}, \dots, a_{1n}, \dots, a_{mn}]^T. \quad (3.27)$$

考虑所有的输入态, 可以得到完整的方程^[175, 249]

$$B \text{vec}(X) = \text{vec}(A). \quad (3.28)$$

通过对输出态的量子态层析, 可以重构出 $\hat{A}$, 再利用线性方程 (3.28) 并考虑半正定和偏迹的约束, 可以估计过程矩阵 $\hat{X}$. 一类数学上很便利的输入态是 $\{|j\rangle\langle k|\}_{1 \leq j, k \leq d}$, 因为此时矩阵 B 会是一个置换矩阵^[249]. 但实验上无法直接制备这样的输入态, 因为它们不满足物理限制. 如文献 [175] 所示, 可以通过线性组合的方式构造这样的输入态. 记 $|+\rangle \triangleq (|j\rangle + |k\rangle)/\sqrt{2}$ 和 $|-\rangle \triangleq (|j\rangle + i|k\rangle)/\sqrt{2}$, 则 $\mathcal{E}(|j\rangle\langle k|)$ 为

$$\mathcal{E}(|j\rangle\langle k|) = \mathcal{E}(|+\rangle\langle +|) + i\mathcal{E}(|-\rangle\langle -|) - \frac{1+i}{2}\mathcal{E}(|j\rangle\langle j|) - \frac{1+i}{2}\mathcal{E}(|k\rangle\langle k|). \quad (3.29)$$

类似于量子态层析, 也可以将量子过程层析转化一个凸优化问题. 在标准量子过程层析里面, Born 定则可以写作 (参见文献 [194])

$$p_{ml} = \text{Tr}[(P_m \otimes \rho_l^*)X], \quad (3.30)$$

其中, P_m 是第 m 个测量算子, ρ_l 是第 l 个输入态. 因为保迹约束本质上是线性约束, 文献 [14] 将保迹的量子过程层析写作如下的凸优化问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{m,l=1}^{d^2} |\hat{p}_{ml} - \text{Tr}[(P_m \otimes \rho_l^*)\hat{X}]|^2 \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{j,k=1}^{d^2} \hat{X}_{jk} E_k^\dagger E_j = I, \quad \hat{X} = \hat{X}^\dagger, \quad \hat{X} \geq 0, \end{aligned} \quad (3.31)$$

其中 $\hat{p}_{ml}$ 是测量数据.

类似地, 也可以用极大似然估计来求解保迹的量子过程层析^[91]. 目的是最大化似然函数

$$\hat{X}_{\text{MLE}} = \arg \max_X \sum_{m,l} \hat{p}_{ml} \ln \text{Tr}[(P_m \otimes \rho_l^*)X] - \text{Tr}[(\Lambda_{\mathcal{L}} \otimes I)X], \quad (3.32)$$

其中 $\Lambda_{\mathcal{L}}$ 是 Lagrange 乘子矩阵, 用来满足保迹 $\text{Tr}_1(X) = I_d$ 的约束条件. 文献 [91] 设计了如下的迭代算法:

- (1) 设置一个满足物理条件的初始值, 如 $X^{(0)} = I/d$. 令 $k = 0$.
- (2) 第 k 步, 计算

$$K^{(k)} = \sum_{m,l} \frac{\hat{p}_{lm}}{\text{Tr}[(P_m \otimes \rho_l^*)X^{(k)}]} P_m \otimes \rho_l^*, \quad (3.33)$$

$$\Lambda_{\mathcal{L}}^{(k)} = [\text{Tr}_2(K^{(k)} X^{(k)} K^{(k)})]^{1/2}. \quad (3.34)$$

(3) 在 $k+1$ 步更新

$$X^{(k+1)} = [(\Lambda_{\mathcal{L}}^{(k)})^{-1} \otimes I] K^{(k)} X^{(k)} K^{(k)} [(\Lambda_{\mathcal{L}}^{(k)})^{-1} \otimes I]. \quad (3.35)$$

(4) 令 $k = k+1$. 重复步骤 (2) 和 (3), 直到误差 $\|X^{(k)} - X^{(k-1)}\| \leq \epsilon$, 其中 $\epsilon > 0$ 是预先设定的误差阈值. 最终给出 $\hat{X}_{\text{MLE}} = X^{(k)}$.

文献 [30] 对于特殊的非保迹的过程, 首先没有考虑偏迹约束, 进行极大似然估计求解; 然后将最大的特征值归一化到 1. 此方法无法扩展到一般的非保迹过程, 因此如何设计满足非保迹的偏迹约束的极大似然估计值得进一步讨论. 对于保迹的过程, 文献 [134, 224] 分别提出一些高效的迭代算法. 目前很多文献也讨论了基于神经网络的量子过程层析, 例如, 文献 [34] 提出了基于对抗神经网络的近似方法来进行量子过程层析, 循环神经网络已被应用于从多体量子系统在随机驱动下的非线性响应中学习其非平衡动力学 [169]. 一些文献也讨论了如何使用自适应的输入态或测量来提高量子层析的精度, 目前主要集中在标准量子层析方案上: 文献 [229] 自适应地选择输入态, 文献 [194, 246] 提出了自适应选择测量算符. 目前尚缺少对自适应量子过程层析的统一刻画.

3.2.2 辅助系统协助过程层析

在辅助系统协助量子过程层析的框架中, 在原始系统 A 之外添加一个额外的辅助系统 B , 则 A 和 B 整体的输入量子态和输出量子态处在一个更高维的 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 中 [9], 如图 2 所示. 为了得到唯一的估计值, 系统维数还需要满足 $d_A \leq d_B$ [9], 本文假设 $d_A = d_B = d$. 对于 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 上任意的高维输入态 σ^{in} , 考虑其 Schmidt 分解 [176]

$$\sigma^{\text{in}} = \sum_{i=1}^{d^2} s_i A_i \otimes B_i, \quad (3.36)$$

其中, $s_i \geq 0$, $\{A_i\}_{i=1}^{d^2}$ 和 $\{B_i\}_{i=1}^{d^2}$ 分别构成了标准正交基, 即 $\text{Tr}(A_i A_j^\dagger) = \delta_{ij} = \text{Tr}(B_i B_j^\dagger)$. 量子态的 Schimdt 数 $\text{Sch}(\sigma^{\text{in}})$ 定义为非零 s_i 的个数. 为了得到唯一的估计值, 需要 $\text{Sch}(\sigma^{\text{in}}) = d^2$, 即 $s_i > 0$, $\forall 1 \leq i \leq d^2$. 可分的输入态也可能是满足此条件的 [9]. 实际上, $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 上几乎任意的量子态都可以用于辅助系统协助量子过程层析, 因为 Schimdt 数小于 d^2 的量子态集合为零测集 [168].

通过过程 $\mathcal{E}$ 后, 输出量子态为

$$\sigma^{\text{out}} = (\mathcal{E} \otimes I)(\sigma^{\text{in}}) = \sum_{i=1}^{d^2} s_i \mathcal{E}(A_i) \otimes B_i. \quad (3.37)$$

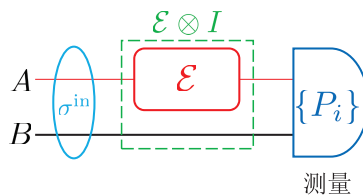


图 2 辅助系统协助量子过程层析示意图, 在原始系统 A 之外添加一个额外的辅助系统 B , A 和 B 整体的输入输出量子态和测量算符处在更高维的 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 中

因为

$$\mathrm{Tr}_B[(I \otimes B_j^\dagger)\sigma^{\mathrm{out}}] = \sum_{i=1}^{d^2} s_i \mathcal{E}(A_i) \mathrm{Tr}(B_j^\dagger B_i) = s_j \mathcal{E}(A_j), \quad (3.38)$$

所以有

$$\mathcal{E}(A_j) = \frac{\mathrm{Tr}_B[(I \otimes B_j^\dagger)\sigma^{\mathrm{out}}]}{s_j}. \quad (3.39)$$

因此, 通过对输出态 σ^{out} 施加完备的测量, 可以得到 d^2 个线性无关的输入输出关系. 从而与标准量子过程层析类似, 也可以用各种算法估计出量子过程 $\mathcal{E}$ 或者量子过程矩阵 X .

一个特殊情形是输入最大纠缠态 (maximally entangled state) $|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^d |j\rangle \otimes |j\rangle / \sqrt{d}$, $|\Psi\rangle$ 在 $d=2$ 时就是 Bell 态, 在 $d=3$ 时就是 Greenberger-Horne-Zeilinger (GHZ) 态. 利用 Choi-Jamiołkowski 同构^[58, 194], 有

$$\rho_{\mathcal{E}} = (\mathcal{E} \otimes I)(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \frac{1}{d} \sum_{i,j=1}^{d,d} \mathcal{E}(|i\rangle\langle j|) \otimes |i\rangle\langle j|, \quad (3.40)$$

可以证明量子过程矩阵 X 与 $\rho_{\mathcal{E}}$ 的关系是

$$X = d\rho_{\mathcal{E}}. \quad (3.41)$$

此时重构量子过程等价于重构输出态, 这体现了辅助系统协助量子过程层析与量子态层析的紧密联系, 但是也有两点主要的不同之处: 一是物理约束不同, 对于量子态是迹为 1, 对于过程矩阵是偏迹小于等于 I ; 二是对应的 Born 定则 (3.2) 与 (3.30) 不同, 如果将过程层析看成态层析, 相当于实验上只能使用直积测量 (product measurement).

文献 [9] 在实验上分别利用 Werner 输入态和最大纠缠态, 验证了辅助系统协助过程层析的有效性, 其中使用的 Werner 态是可分态. 实验上高维的纠缠态不容易制备, 这限制了辅助系统协助过程层析在高维量子系统的应用. 在光学实验上, 文献 [210, 248] 分别实现了十光子纠缠和十四光子纠缠. 在此类框架下, 如何进行自适应的过程层析还没有得到充分的讨论, 虽然与自适应态层析有很多相似之处, 但是并不能将自适应态层析直接推广到过程层析.

3.2.3 Hamilton 量辨识

第 3.2.1 和 3.2.2 小节讨论的是一般的面向开放系统的量子过程层析. 对于封闭系统, 其动态过程更加简单, 由系统的 Hamilton 量 H 决定, 此时量子态的演化满足 (1.2), 显然是 (3.19) 的一个特例. 因此, 封闭系统的 Hamilton 量辨识 (Hamiltonian identification), 即通过系统输入输出辨识其未知的 Hamilton 量, 相当于封闭系统的过程层析, 只不过封闭系统对应的过程矩阵还额外需要满足 $\mathrm{rank}(X) = 1$. 所以也可以用标准量子过程层析或辅助系统协助量子过程层析去估计 X , 然后再重构对应的酉矩阵和 Hamilton 量. 文献 [249] 基于以上的分析, 提出了两阶段优化算法来估计 Hamilton 量, 该算法是解析的, 因此可以得到计算复杂度 $O(d^6)$ 及误差上界

$$\mathbb{E}\|\hat{H} - H\| = O\left(\frac{d^3}{\sqrt{N}}\right), \quad (3.42)$$

其中 N 是总的输入态拷贝数. 该算法进而在文献 [252] 中被优化至具有 $O(d^3)$ 的计算复杂度.

文献 [287] 提出了另外一套基于线性系统理论的 Hamilton 量辨识算法. 利用第 3.1.4 小节定义的单位正交基 $\{\Omega_j\}$, 可知 $\{i\Omega_j\}_{j=1}^{d^2-1}$ 是 Lie 代数 $\mathfrak{su}(d)$ 的一组正交基, 其中 $\mathfrak{su}(d)$ 表示所有的 $d \times d$ 的反 Hermite 矩阵. 因此这些基满足

$$[i\Omega_j, i\Omega_l] = \sum_{k=1}^{d^2-1} D_{jlk} i\Omega_k, \quad (3.43)$$

其中 D_{jlk} 称为 Lie 代数 $\mathfrak{su}(d)$ 结构常数. 对于 Hamilton 量 H , 假设 $\text{Tr}(H) = 0$, 则其可以在 $\{\Omega_j\}$ 上展开为

$$H = \sum_{m=1}^{d^2-1} h_m \Omega_m. \quad (3.44)$$

定义 $x_j(t) \triangleq \text{Tr}[\Omega_j \rho(t)]$, 则其动态微分方程为

$$\dot{x}_j(t) = \sum_{k=1}^{d^2-1} \left(\sum_{m=1}^{d^2-1} D_{mjk} h_m \right) x_k(t). \quad (3.45)$$

定义实向量 $x \triangleq [x_1, \dots, x_{d^2-1}]^T$, 通常称为相干向量 (coherence vector), 则有

$$\dot{x} = A_c x, \quad (3.46)$$

其中因为结构常数是反对称的, 所以 $A_c = -A_c^T$ 是反对称实矩阵. 将初始态 ρ_0 展开为

$$\rho_0 = \frac{1}{\sqrt{d}} \Omega_0 + \sum_{k=1}^{d^2-1} x_{k,0} \Omega_k. \quad (3.47)$$

假设可观测量是 O , 其必须为一个 Hermite 矩阵并满足 $\text{Tr}(O) = 0$, 其在基下的展开为

$$O = \sum_{k=1}^{d^2-1} C_k \Omega_k. \quad (3.48)$$

定义实向量 $C \triangleq [C_1, \dots, C_{d^2-1}]$, 则可观测量的时间轨迹 (time traces) 为 $y(t) = Cx(t)$. 可得整个系统动态方程或状态空间方程为

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = A_c x(t), & A_c = -A_c^T, & x(0) = x_0, \\ y(t) = Cx(t). \end{cases} \quad (3.49)$$

所有与 Hamilton 量有关的参数都在反对称矩阵 A_c 中, 需要根据已知的输入量子态 ρ_0 与输出 $y(t)$ 辨识出 Hamilton 量中的未知参数. 对于实际中一些有结构特征的 Hamilton 量, 确定观测量 O 后, 其对应的系统演化可能只对应 (3.49) 的一个子空间, 因此利用滤子 (filtration) [211], 可以得到一组更低维数的状态空间方程

$$\begin{cases} \dot{\tilde{x}}(t) = \tilde{A}_c \tilde{x}(t), & \tilde{A}_c = -\tilde{A}_c^T, \\ y(t) = \tilde{C} \tilde{x}(t), \end{cases} \quad (3.50)$$

其中 $\tilde{A}_c$ 和 $\tilde{C}$ 分别是 A_c 和 C 的子矩阵. 例如, 一个 n 比特的一维自旋链 (spin chain), 其 Hamilton 量为 (参见文献 [287])

$$H = \sum_{k=1}^n \frac{\omega_k}{2} \sigma_z^k + \sum_{k=1}^{n-1} \delta_k (\sigma_+^k \sigma_-^{k+1} + \sigma_-^k \sigma_+^{k+1}). \quad (3.51)$$

如果观测量是第一个量子比特的 σ_x , 即 $\langle \sigma_x^1(t) \rangle$, 此时矩阵 $\tilde{A}_c$ 维数为 $2n \times 2n$, 远低于原系统 A_c 的维数 $2^n \times 2^n$.

这类系统辨识问题在传统的控制理论中, 有很多算法来实现. 在设计具体的辨识算法之前, 首先要确认利用实验的数据可以唯一确定 Hamilton 量, 即解决 Hamilton 量的可辨识性问题. 基于文献 [287] 的上述建模框架, 文献 [220, 250] 分别利用 Gröbner 基这一工具与经典系统可辨识性判别的相似变换法, 数值与理论地解决了 Hamilton 量可辨识性的判别问题.

在一般性辨识算法的设计方面, 文献 [287] 采用了 ERA (eigenstate realization algorithm). 该算法的流程是, 首先测量观测量在不同时间点的平均值, 例如得到 $\langle \sigma_x^1(t) \rangle$ 的时间轨迹, 然后利用 ERA 算法, 重构出一个满足输入输出关系的最小实现系统. 该系统与实际系统是等价的, 因此具有相同的传递函数. 利用传递函数相等这一条件, 文献 [287] 将辨识问题转化为多元多项式方程组的求解问题. 该方法的优点是充分利用了 Hamilton 量的先验结构信息, 其与量子过程层析不同, 无需输入多种量子态和对输出态作量子态层析, 只需要少量的可观测量的轨迹, 就可以实现高精度且鲁棒的估计, 适用于测量受限、有 Hamilton 量先验结构信息的量子系统, 数值仿真^[287]和实验^[121]都验证了此算法的高效性与鲁棒性.

其他 Hamilton 量辨识方法还包括基于 Bayes 优化的方法^[223, 257], 这类方法也被称为量子 Hamilton 量学习, 其有效性在许多不同的实验平台和任务上得到了验证, 如 NV (nitrogen-vacancy) 色心^[98, 247]、磁场的量子传感^[130, 209]和量子控制^[279]等. 许多文献也使用深度学习的方法来进行 Hamilton 量学习. 文献 [265] 利用神经网络从对 Hamilton 量基态的测量来重构 Hamilton 量. 文献 [57] 利用循环神经网络估计时变的 Hamilton 量. 文献 [12] 利用对热态 $\rho = \exp(-\beta H) / \text{Tr}[\exp(-\beta H)]$ 作测量 (测量次数只需要为粒子数的多项式) 来重构空间局域的 Hamilton 量, 其中 β 为逆温度.

实际物理系统往往与环境有耦合, 按照耦合的方式可以分为 Markov 开放量子系统与非 Markov 开放量子系统^[38]. 前者是无记忆效应的开放量子系统, 其动态过程由 Lindblad 主方程决定^[39]:

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^{d^2-1} g_{jk} ([\Omega_j, \rho \Omega_k^\dagger] + [\Omega_j \rho, \Omega_k^\dagger]), \quad (3.52)$$

其中 $G = [g_{jk}] \geq 0$ 是退相干矩阵^[6]. 该主方程也可以写成线性系统状态空间的形式^[6, 288]

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = A_o x(t) + b, \\ y(t) = Cx(t). \end{cases} \quad (3.53)$$

与封闭系统对比, 此时实矩阵 A_o 不再是反对称的, 并且系统增加了实向量 b . 文献 [288] 将 Hamilton 量辨识的框架扩展到 Markov 开放量子系统, 提出了同时估计 Hamilton 量和开放系统参数的算法. 文献 [269] 提出了梯度算法解决这一同时估计的任务. 其他启发式的算法也在文献 [50, 185] 得到了讨论.

对于非 Markov 的系统, $t+t'$ 时的量子态 $\rho_{t+t'}$ 不仅依赖于 ρ_t , 也依赖于环境的历史, 因此是有记忆性的, 此时主方程写为

$$\dot{\rho}_t = \int_0^t \mathcal{K}_{t,s}[\rho_s] ds, \quad (3.54)$$

其中 $\mathcal{K}_{t,s}$ 是时间非局域的超算符 (time-nonlocal superoperator) [38,39]. 文献 [255] 在量子处理器上验证了非 Markov 性. 文献 [256] 利用张量网络进行了非 Markov 的量子过程层析. 文献 [264,268,270] 利用梯度算法对环境进行了估计. 文献 [15] 利用循环神经网络对非 Markov 过程进行了建模.

3.3 量子探测器层析

测量在量子科技中几乎无处不在, 是沟通量子物理世界和经典世界的桥梁. 我们使用探测器来获得实验结果, 探测器由一组测量算符 $\{P_i\}_{i=1}^n$ 确定, 其中每一个 P_i 都是 Hermite 半正定的, 且 $\sum_i P_i = I$, 每个 P_i 称为一个 POVM 元素. 利用已知的测量算符, 可以实现量子态层析. 类似地, 利用已知的量子态, 可以实现量子探测器层析.

探测器主要可以分为两类: 非相位敏感探测器 (phase-insensitive detector) 和相位敏感探测器 (phase-sensitive detector). 非相位敏感探测器可以探测光子数而不能测量光子之间的相干性 (coherence), 因此数学上其对应的 POVM 在光子数基下都是对角矩阵. 相反地, 相位敏感的探测器可以获得光子态间的相干性, 对应的 POVM 有非对角元, 因此重构相位敏感的探测器更加困难. 实验上, 量子探测器层析已被应用到光学光子计数 (optical photon-counting) [152,291] 和零差检测 (homodyne detection) 的表征中 [106,290].

下面介绍 3 类探测器层析算法: 凸优化、极大似然估计和两阶段算法, 都主要针对的是相位敏感探测器.

3.3.1 凸优化与极大似然估计方法

准备 M 个不同的量子态 $\{\rho_j\}_{j=1}^M$, 输入到探测器 $\{P_i\}_{i=1}^n$ 后, 得到实验测量值 $\{\hat{p}_{ij}\}_{i,j=1}^{n,M}$, 则可将探测器层析描述为凸优化问题来求解 [106,152,291]:

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i,j=1}^{n,M} [\hat{p}_{ij} - \text{Tr}(\rho_j P_i)]^2 \\ \text{s.t.} \quad & P_i \geq 0, \quad P_i = P_i^\dagger, \quad \forall 1 \leq i \leq n, \quad \sum_i P_i = I. \end{aligned} \quad (3.55)$$

类似于态层析与过程层析, 也可以用极大似然估计来建模与求解. 定义如下的似然函数 [90]:

$$\{\hat{P}_i^{\text{MLE}}\}_{i=1}^n = \arg \max_{\{P_i\}} \sum_{i,j=1}^{n,M} \hat{p}_{ij} \ln \text{Tr}(\rho_j P_i) - \sum_{i=1}^n \text{Tr}(\Lambda_{\mathcal{L}} P_i), \quad (3.56)$$

其中 $\Lambda_{\mathcal{L}}$ 为 Lagrange 乘子矩阵, 使得完备性约束 $\sum_{i=1}^n P_i = I$ 满足. 文献 [90] 给出如下的迭代算法:

- (1) 给定一个符合物理约束的初始值, 如 $P_i^{(0)} = I/n$, $1 \leq i \leq n$. 令 $k = 0$.
- (2) 在第 k 步, 计算

$$R_i^{(k)} = \sum_{j=1}^M \frac{\hat{p}_{ij}}{\text{Tr}[\rho_j P_i^{(k)}]} \rho_j, \quad (3.57)$$

更新的 Lagrange 乘子为

$$\Lambda_{\mathcal{L}}^{(k)} = \left(\sum_{i=1}^n R_i^{(k)} P_i^{(k)} R_i^{(k)} \right)^{1/2}. \quad (3.58)$$

(3) 第 $k+1$ 步更新估计值为

$$P_i^{(k+1)} = (\Lambda_{\mathcal{L}}^{(k)})^{-1} R_i^{(k)} P_i^{(k)} R_i^{(k)} (\Lambda_{\mathcal{L}}^{(k)})^{-1}. \quad (3.59)$$

(4) 令 $k = k+1$. 重复步骤 (2) 和 (3), 直到误差 $\sum_{i=1}^n \|P_i^{(k)} - P_i^{(k-1)}\| \leq \epsilon$, 其中 $\epsilon > 0$ 是预先设定的误差阈值. 最终输出 $\{\hat{P}_i^{\text{MLE}}\}_{i=1}^n = \{P_i^{(k)}\}_{i=1}^n$.

3.3.2 两阶段算法

凸优化和极大似然估计都是迭代算法, 难以给出解析的计算复杂度, 因此文献 [253] 提出了两阶段优化的解析算法. 将第 i 个 POVM 元素和第 j 个量子态在第 3.1.4 小节定义的单位正交基 $\{\Omega_j\}$ 下展开为

$$P_i = \sum_{a=1}^{d^2} \theta_a^{(i)} \Omega_a, \quad \rho_j = \sum_{b=1}^{d^2} \tau_b^{(j)} \Omega_b, \quad (3.60)$$

其中 $\theta_a^{(i)} \triangleq \text{Tr}(P_i \Omega_a)$ 和 $\tau_b^{(j)} \triangleq \text{Tr}(\rho_j \Omega_b)$ 都是实数. 当将第 j 个量子态输入到探测器时, 第 i 个 POVM 的测量结果出现的理想概率值为

$$p_{ij} = \text{Tr}(P_i \rho_j) = \sum_{a=1}^{d^2} \tau_a^{(j)} \theta_a^{(i)} = \Gamma_j^T \Theta_i, \quad (3.61)$$

其中, $\Gamma_j \triangleq (\tau_1^{(j)}, \tau_2^{(j)}, \dots, \tau_{d^2}^{(j)})^T$, $\Theta_i \triangleq (\theta_1^{(i)}, \theta_2^{(i)}, \dots, \theta_{d^2}^{(i)})^T$. 实际的实验结果会存在误差, 假设实际的测量结果为 $\hat{p}_{ij}$, 则测量误差为 $e_{ij} = \hat{p}_{ij} - p_{ij}$. 由中心极限定理可知, e_{ij} 会收敛到均值为 0、方差为 $(p_{ij} - p_{ij}^2)/(N/M)$ 的 Gauss 分布上, 其中 N 是总的拷贝数. 定义 $\Theta \triangleq (\Theta_1^T, \Theta_2^T, \dots, \Theta_n^T)^T$ 是所有未知参数组成的向量, 输入量子态的参数矩阵为 $\Gamma_0 \triangleq (\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_M)^T$, $\hat{Y} \triangleq (\hat{p}_{11}, \dots, \hat{p}_{1M}, \hat{p}_{21}, \dots, \hat{p}_{nM})^T$, $\Gamma = I_n \otimes \Gamma_0$, $e \triangleq (e_{11}, \dots, e_{1M}, e_{21}, \dots, e_{nM})^T$, $\mathcal{S} \triangleq (1, 1, \dots, 1)_{1 \times n} \otimes I$, $\mathcal{D}_{d^2 \times 1} \triangleq (\sqrt{d}, 0, \dots, 0)^T$, 则可以得到完整的线性方程

$$\hat{Y} = \Gamma \Theta + e, \quad (3.62)$$

带有一个为了满足完备性条件的线性约束

$$\mathcal{S} \Theta = \mathcal{D}. \quad (3.63)$$

文献 [253] 中两阶段算法的第一阶段是求解以上带线性约束的线性方程. 可以给出如下的带线性约束的最小二乘解析解:

$$\hat{\Theta}_{\text{CLS}} = \hat{\Theta}_{\text{LS}} - (\Gamma^T \Gamma)^{-1} \mathcal{S}^T [\mathcal{S} (\Gamma^T \Gamma)^{-1} \mathcal{S}^T]^{-1} (\mathcal{S} \hat{\Theta}_{\text{LS}} - \mathcal{D}), \quad (3.64)$$

其中 $\hat{\Theta}_{\text{LS}}$ 是不考虑约束的最小二乘解,

$$\hat{\Theta}_{\text{LS}} = (\Gamma^T \Gamma)^{-1} \Gamma^T \hat{Y}. \quad (3.65)$$

从 $\hat{\Theta}_{\text{CLS}}$ 提取出 $\tilde{\theta}_a^{(i)}$. 由于第一阶段没有考虑半正定的约束, 因此得到的估计值 $\hat{E}_i = \sum_{a=1}^{d^2} \tilde{\theta}_a^{(i)} \Omega_a$ 可能有负的特征值. 为了满足半正定的约束, 需要对 $\{\hat{E}_i\}_i$ 进行修正. 假设 $\hat{E}_i$ 的特征分解为

$$\hat{E}_i = \hat{W}_i \text{diag}[(\hat{K}_i)_{11}, (\hat{K}_i)_{22}, \dots, (\hat{K}_i)_{dd}] \hat{W}_i^\dagger, \quad (3.66)$$

其中 $(\hat{K}_i)_{11} \geq \dots \geq (\hat{K}_i)_{(d-\hat{n}_i)(d-\hat{n}_i)} \geq 0 > (\hat{K}_i)_{(d-\hat{n}_i+1)(d-\hat{n}_i+1)} \geq \dots \geq (\hat{K}_i)_{dd}$. 首先将 $\hat{E}_i$ 分解为 $\hat{E}_i = \hat{F}_i - \hat{G}_i$, 其中,

$$\hat{F}_i = \hat{W}_i \text{diag}[(\hat{K}_i)_{11}, (\hat{K}_i)_{22}, \dots, (\hat{K}_i)_{(d-\hat{n}_i)(d-\hat{n}_i)}, 0, \dots, 0] \hat{W}_i^\dagger \geq 0, \quad (3.67)$$

$$\hat{G}_i = -\hat{W}_i \text{diag}[0, \dots, 0, (\hat{K}_i)_{(d-\hat{n}_i+1)(d-\hat{n}_i+1)}, (\hat{K}_i)_{(d-\hat{n}_i+2)(d-\hat{n}_i+2)}, \dots, (\hat{K}_i)_{dd}] \hat{W}_i^\dagger \geq 0. \quad (3.68)$$

然后考虑如下分解:

$$\sum_{i=1}^n \hat{F}_i = I + \sum_{i=1}^n \hat{G}_i = \hat{C}^2, \quad (3.69)$$

其中 $\hat{C} = \sqrt{I + \sum_i \hat{G}_i}$. 最后得到的估计值为

$$\hat{P}_i = \hat{C} \hat{F}_i \hat{C}^{-1}, \quad 1 \leq i \leq n. \quad (3.70)$$

容易验证 $\sum_{i=1}^n \hat{P}_i = I$ 且 $\hat{P}_i \geq 0, 1 \leq i \leq n$. 该两阶段算法是解析的, 文献 [253] 给出总的计算复杂度为 $O(nd^2M)$ 和误差上界

$$\mathbb{E} \left(\sum_{i=1}^n \|\hat{P}_i - P_i\|^2 \right) \leq \frac{(dn + 2\sqrt{dn} + 1)(n-1)M}{4N} \text{Tr}[(\Gamma_0^T \Gamma_0)^{-1}]. \quad (3.71)$$

基于此误差上界和考虑系统的鲁棒性, 文献 [262] 进一步提出了最优的量子输入态, 包含 SIC (symmetric informationally complete) 输入态和 MUB (mutually unbiased bases) 输入态. 两阶段算法的缺点是得到的不一定是最优解, 可能是次优解, 但是与极大似然估计算法相比, 达到相同精度的时间消耗一般要少很多 [253]. 实验上常使用相干态来作量子探测器层析, 由于实际相干输入态集合的线性独立性不够理想, 常会导致估计的结果偏差很大. 为了解决这一问题, 正则化被应用到凸优化 [152, 291] 和两阶段算法 [263] 中. 一些文献也研究了自适应的量子探测器层析: 文献 [65] 利用自适应的算法提高了对零差探测器的估计精度; 文献 [262] 提出了两步自适应的算法, 并证明了算法可以达到最优的非保真度收敛速率 $O(1/N)$.

3.4 小结与展望

量子态层析、量子探测器层析和量子过程层析是相互关联的, 在量子态层析中, 假设探测器是已知的; 而在量子探测器层析中, 假设量子态是已知的. 实际上, 量子态和探测器的制备都是存在误差的. 一方面, 我们总可以利用容易制备的高精度的量子态和探测器来分别作探测器层析和量子态层析, 其中的制备误差与估计误差相比可以忽略. 另一方面, 为了解决这种相互依赖的关系, 自校正 (self-calibrating) 的量子态层析 [182] 和量子探测器层析算法 [165, 282] 被提出, 而量子过程层析是依赖于另外两种层析的, 为了解决这个问题, 文献 [163, 173] 提出了量子门组层析 (gate set tomography), 不依赖于输入态和探测器, 但是得到的估计值可能不唯一. 针对量子层析的其他综述, 还可参见文献 [75, 97].

量子层析与经典参数辨识也有异同之处. 在建模时, 量子层析与传统的传递函数辨识都可以写为线性方程 $\hat{y} = \Phi\theta + e$ 的形式, 都可以用最小二乘法求解, 但是物理含义有很大不同. 量子层析中参数化矩阵 Φ 依赖于测量算符, 但是传统的传递函数辨识中, Φ 可能还依赖于系统的输出. 在传统的系统辨识中, 系统的噪声通常是未知的, 需要提前估计; 而在量子层析中, 测量噪声是依赖于测量值的, 一般不需要提前估计, 而且随着拷贝数 N 的增加, 量子层析中的测量噪声方差是 $O(1/N)$ 收敛的, 但是

传统系统辨识噪声的方差一般假设是不变的. 随着测量次数的增加, 传统系统的参数矩阵 Φ 维数也会逐渐增加, 但是量子层析的 Φ 是固定的维数, 因此更适合用最小二乘求解.

总的来说, 量子层析领域还在蓬勃发展, 是推动量子精密测量、量子控制乃至量子信息技术发展的基础工程. 此领域也还有很多开放问题值得研究, 这里介绍两个有潜力的方向. 量子层析一个核心的问题是, 如何设计高效的算法、解决指数爆炸的问题. 目前的机器学习和阴影层析证明了设计高效算法的潜力, 我们还需要设计更加高效的算法以辨识或估计未来的几百、几千甚至更多量子比特的量子计算机的状态; 另一个方向是设计对所有的层析都适用的自适应层析框架, 并给出框架性能的解析刻画, 这有助于大幅度提高量子层析的精度以及量子传感的效率.

4 时变参数/信号的估计

对任何系统的信息提取过程都不可避免地要在一定程度上受到系统所处环境的影响. 量子系统所处的环境常常带有时变、随机的特征, 也被称为噪声. 量子滤波研究如何在噪声特性已知的情形给出对量子系统信息的最优估计. 而当噪声特性未知时, 为了实现系统的信息提取或最优控制, 通常需要先估计环境噪声的相关信息, 如噪声的均值和方差等统计量, 尤其是非 Markov 噪声的功率谱密度 (power spectral density, PSD) 函数 (简称为谱函数), 这类工作被称为噪声谱估计.

在这两类工作中, 一个重要的问题是如何处理量子系统的不对易特性. 在量子滤波理论中, 不对易特性造成量子概率空间无法与经典的概率空间一一对应. 因此, 经典的滤波方法通常无法直接应用于量子系统. 而在量子噪声谱学中, 量子噪声的引入以及算子的不对易性也使得模型描述与经典情形不同, 并且问题的维数增加导致估计难度大大增加. 因此现有工作关注如何对量子系统中的估计问题进行合适的描述和建模, 并在此基础上提出合适的解决方案.

4.1 量子滤波

当量子系统的状态或参数随时间动态变化时, 其估计问题常需用滤波理论解决. 量子滤波理论通常用当前时刻和之前历史的噪声信号或部分可观测信息对量子系统的状态或参数进行估计. 量子滤波理论对建立基于测量的反馈控制理论有着至关重要的作用^[21, 24, 59, 206, 259]. Belavkin^[21–24] 较早进行了量子滤波理论的研究, 在量子非破坏测量框架下利用操作形式主义 (operational formalism) 研究了量子滤波问题. 在物理领域, 20 世纪 90 年代一些物理学家也独立研究了量子滤波理论, 通常称为量子轨迹理论 (quantum trajectory theory)^[45].

量子概率理论经常被用作建立量子滤波理论的一个有力工具. 在量子概率理论中, 可以通过谱定理在 Hilbert 空间上量子算符的对易子代数和经典 Kolmogorov 概率空间之间建立一个同构的 (isomorphic) 等价. 例如, 可以考虑一个 n 维复 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$, 在 $\mathcal{H}$ 上的任意自伴算符 O 有如下谱分解:

$$O = \sum_{j=1}^n o_j P_{o_j}, \quad (4.1)$$

其中, $\{o_j\}$ 是相应的特征值, 正交投影算符 $\{P_{o_j}\}$ 满足 $P_{o_j} P_{o_k} = \delta_{jk} P_{o_k}$ 和 $\sum_{j=1}^n P_{o_j} = I$. 对任意的连续函数 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, 有 $f(O) = \sum_{j=1}^n f(o_j) P_{o_j}$. 因而, 集合 $\mathcal{O} = \{X: X = f(O), f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}\}$ 构成一个 O 生成的对易星代数 (*-algebra). 记 $\mathbb{P}: \mathcal{O} \rightarrow \mathbb{C}$ 为一个映射满足如下两个关系: (i) 当 $X \geq 0$ 时, $\mathbb{P}(X) \geq 0$; (ii) $\mathbb{P}(I) = 1$. 则总存在一个密度算符 ρ 使得 $\mathbb{P}(X) = \text{Tr}(\rho X)$ 成立. 当 $\mathcal{N}$ 是一个 Hilbert

空间 $\mathcal{H}$ 上的对易星代数时, $(\mathcal{N}, \mathbb{P})$ 能被定义成一个量子概率空间^[31]. 类似于经典情形, 一个量子观测量的优化估计可以通过基于系列连续非破坏量子测量结果的量子条件期望给出. 一个量子滤波器可以用参考概率方法 (reference probability method) 按照 Itô 随机微分方程的形式得出^[31, 94]. 量子滤波理论已被广泛用于量子光学系统的分析和控制中. 在实际应用中, 不同可观测量的非对易关系必须被纳入考量, 需要合适地设计对易星代数的结构来满足特定要求.

如图 3 所示, 考虑一个光学系统, 其中场算子 B_t 和 $B_t^\dagger$ 代表环境噪声, 可以近似为 Wiener 过程^[46], 其计算需引入量子 Itô 规则, 如 $dB_t dB_t^\dagger = dt$ 和 $dB_t^\dagger dB_t = dB(t)dB(t) = dB_t^\dagger dB_t = 0$. 目标量子系统通常为—组原子或者光腔系统, 其系统状态用—组算符 X_t 表示, 其时间演化为 $X_t = U_t^\dagger X_0 U_t$, 其中 $U(t)$ 表示系统演化的酉算子. 环境与目标量子系统交互后的输出, 用算子 $\tilde{B}_t = U_t^\dagger B_t U_t$ 表示. 使用 Itô 规则, 可以得到系统状态的演化方程

$$dj_t(X) = j_t(\mathcal{L}_{L,H}(X))dt + j_t([L^*, X])dA_t + j_t([X, L])dA_t^*, \quad X \in \mathcal{B}, \quad (4.2)$$

其中, $j_t(X)$ 表示 X_t 的真实值, H 是系统 Hamilton 量, L 是作用在目标量子系统的算符, 其表示系统和环境之间的耦合, 所以一般也称作耦合算子 (coupling operator). $\mathcal{L}$ 是量子 Lindblad 算符. 在本例中, 假设给定测量为零差探测 $Y_t = \tilde{B}_t + \tilde{B}_t^\dagger$, 其演化方程为

$$dY_t = j_t(L + L^*)dt + dA_t + dA_t^*. \quad (4.3)$$

量子滤波旨在给出以下条件期望:

$$\pi_t(X) = \mathbb{P}(j_t(X) | \mathcal{Y}_t), \quad (4.4)$$

其中, $\pi_t(X)$ 是对 X_t 的估计, $\mathcal{Y}$ 代表测量所张成的对易星子代数^[31]. 因为 Y_t 并不是简单的 Wiener 过程, 所以在 $\mathbb{P}$ 所代表的测度下, 条件期望的计算比较困难. 通常考虑引入量子 Bayes 公式进行测度转换, 将此条件期望转换到更简单的测度下进行计算. $\pi_t(X)$ 的递归方程 (recursive equation) 可以由参考概率方法^[31] 或者条件特征函数方法 (conditional characteristic function method) 得到.

给定以上工具, 图 3 所示系统状态的滤波方程为

$$d\pi_t(X) = \pi_t(\mathcal{L}_{L,H}(X))dt + (\pi_t(L^\dagger X + X L) - \pi_t(L^\dagger + L)\pi_t(X))dW_t, \quad (4.5)$$

其中随机过程 $dW_t = dY_t - \pi_t(L^\dagger + L)dt$ 是 Wiener 过程. 进一步地, 由 $\pi_t(X) = \text{Tr}(\rho_t X)$, 可得如下随机主方程用来更新对密度算子的估计:

$$d\rho_t = -i[H, \rho_t]dt + \left(L\rho_t L^\dagger - \frac{1}{2}L^\dagger L\rho_t - \frac{1}{2}\rho_t L^\dagger L \right)dt + (L\rho_t + \rho_t L^\dagger - \text{Tr}[(L + L^\dagger)\rho_t]\rho_t)dW_t. \quad (4.6)$$

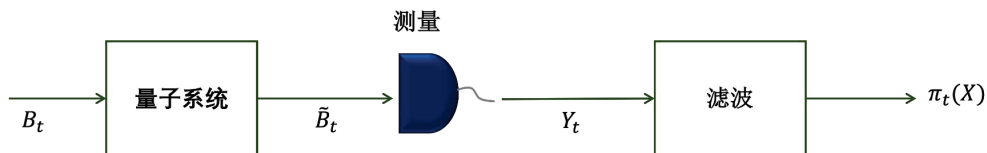


图 3 本图简略刻画了量子滤波基本元素. 算符 B_t 表示环境. 输入信号 B_t 通过与量子系统进行交互后的输出信号为 $\tilde{B}_t$. 经过测量后得到的 Y_t 经过量子滤波算法, 给出对于感兴趣的量子状态的估计 $\pi_t(X)$. 区别于图 1, 这里的测量施加于环境, 而非直接施加于目标量子系统

针对 Markov 过程/Gauss 噪声, 相应的量子滤波方程对应经典非线性过程中的 Zakai 方程^[21–23]. 对于 Gauss 噪声的线性系统, 其滤波方程形式类似于经典滤波中的 Kalman-Bucy 方程^[22, 23, 32, 45, 234, 284, 285]. 而针对非 Gauss 的输入, 一般通过引入一个辅助系统 (ancilla system/extended system) 来描述非 Gauss 的部分^[37, 78, 104, 105, 221, 267].

另一个挑战性的问题是设计量子滤波器来同时估计量子随机变量和经典随机变量^[94, 234]. 此类问题一般的应用包括量子传感和量子容错滤波等. 在此类问题中, 考虑目标量子系统的参数是动态变化的, 遵循经典的 Markov 随机过程. 问题的难点在于量子概率空间和经典概率空间的不统一, 导致问题的概率空间描述并不显然. 此时需要针对这个混合量子 - 经典系统的概率定义一个增广的概率空间用来描述量子状态和经典信息的联合分布. 例如, Gao 等^[94] 考虑量子系统的参数向量 R 是一个定义在经典概率空间 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$ 上的经典的随机跳变过程. R 是离散取值的且 $R \in \{R_1, \dots, R_{n_r}\}$. 在此基础上, 他们定义了增广的线性概率空间 $\ell^\infty(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P}) \otimes \mathcal{N}$. 在此概率空间上, 他们定义了有界随机观察量 (bounded random observable) $A_R = v(R)U_R^\dagger AU_R = \sum_{k=1}^{n_r} v(R_k)\mathbf{1}_{R=R_k} \otimes U_{R_k}^\dagger AU_{R_k}$, 其中 $v(R_k)$ 是标量方程. 相应的量子 - 经典期望定义为 $\tilde{\mathbb{P}}(x \otimes X) = \mathbb{E}_{\mathcal{P}}\{x \operatorname{Tr}\{\rho X\}\} : \ell^\infty(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P}) \otimes \mathcal{N} \rightarrow \mathbb{R}$. 从而可以定义量子 - 经典条件期望

$$\tilde{\mathbb{P}}(X | \tilde{\mathcal{G}}) = \sum_{\tilde{\mathbb{P}}(\tilde{P}_{jk}) \neq 0} \frac{\tilde{\mathbb{P}}(\tilde{P}_{jk}X)}{\tilde{\mathbb{P}}(\tilde{P}_{jk})} \tilde{P}_{jk}, \quad \forall X \in \tilde{\mathcal{G}}', \quad (4.7)$$

其中, $\tilde{P}_{jk} = \mathbf{1}_{R=R_k} \otimes U_{R_k}^\dagger P_{A_j} U_{R_k}$, $\tilde{\mathcal{G}}'$ 是 $\tilde{\mathcal{G}}$ 的换位 (commutant). 由以上定义并且结合其提出的量子 - 经典 Bayes 公式, 可得到量子 - 经典的容错滤波方程, 以实现量子系统的容错估计.

类似地, Tsang^[234] 考虑量子系统的参数是动态连续的随机过程, 定义了混合经典 - 量子密度算符 (hybrid classical-quantum density operator) $\hat{\rho}_t(x_t)$ 来描述混合经典 - 量子联合概率分布, 使得经典的概率密度为 $P(x_t) = \operatorname{Tr}[\hat{\rho}_t(x_t)]$, 量子密度算符为 $\hat{\rho}_t = \int dx_t \hat{\rho}_t(x_t)$. 基于这个增广的概率空间, 他给出了相应的条件概率的定义. 结合 Wigner 分布, 相应的滤波问题可以在增广的概率空间中进行定义和求解. 对于线性系统, 这类问题最后可以采用经典的线性滤波方法. 对于非线性问题, 可以进行线性化处理^[276, 277], 或者采用一些非最优的估计方法. 也有一类方法考虑轮流更新对参数和量子状态的估计, 即估计当前参数时, 不考虑对量子状态的估计; 而进行量子状态的估计时, 并不同时更新对参数的估计^[241].

在量子滤波中, t 时刻滤波器的估计是基于 t 时刻前的观测记录. 当不需要实时估计时, 可以建立量子平滑 (quantum smoothing) 理论来进一步提升估计性能^[54, 93, 110, 131, 157, 181, 272]. 在量子平滑中, 在 t 时刻之前 (过去记录) 和之后 (将来记录) 的观测记录被同时利用. 已有研究发现, 基于过去和将来记录的量子平滑估计相比较量子滤波能达到更好的估计性能^[54]. 一个直观的原因是量子平滑用到了比量子滤波更多的观测信息. 由于 t 时刻的量子可观测量可能与之后时刻表示系统测量结果的算符不对易, 直接应用经典平滑理论到量子平滑问题可能导致非物理的估计结果. 因而需要建立系统的量子平滑理论来满足量子系统中的一些特定需求. 与量子平滑有关的早期工作是弱值 (weak value) 的提出. 对于一个弱测量系统, 其某个时刻的量子态由一个二元组 (ρ, E) 来定义, 其中 ρ 算子由时刻 t 之前的测量数据得到, 而 E 算子则由 t 时刻之后的测量得到. 在 t 时刻的某个测量算子的测量值由

$$Q_{\text{swv}} = \frac{E\rho + \rho E}{\operatorname{Tr}(E\rho + \rho E)} \quad (4.8)$$

给出, 这个值就是弱值, 即包含了过去和未来的测量信息. 基于弱值的量子平滑工作参见文献^[93, 286]等. 但是由于某个测量算子的弱值可以取到非其本征值的数, 其物理意义一直饱受争议^[233, 235]. 因此

部分研究者提出新的量子平滑理论, 并且致力于定义一个具有物理意义的密度算符, 此算符由过去及未来的测量信息得到 [54, 55, 110]. 在这系列工作中, 研究者考虑一个事实: 大部分的测量都不是完美的, 在测量过程中, 由于目标系统与环境之间有一些未被观测到的交互, 这类信息对于测量者是未知的. 例如, 对系统进行一个零差探测, 测量效率只有 90%, 则有 10% 的信息未被测量. 令 $\vec{\mathbf{O}}$ 表示所有时刻的测量, $\hat{\mathbf{U}}_t$ 表示 t 时刻之前的所有未知测量, 文献 [110] 提出可以用可观测到的测量 $\vec{\mathbf{O}}$ 对未观测到的测量 $\hat{\mathbf{U}}_t$ 进行平滑估计, 得到 $\hat{\mathbb{P}}(\hat{\mathbf{U}}_t | \vec{\mathbf{O}})$. 然后在 t 时刻的系统状态, 可用已观测到的结果 $\vec{\mathbf{O}}$ 和被估计出的未观测到的测量结果对系统状态进行滤波估计得到 [54, 55, 110]:

$$\rho_S(t) = \mathbb{E}_{\hat{\mathbf{U}}_t | \vec{\mathbf{O}}}[\rho_{\hat{\mathbf{U}}_t, \vec{\mathbf{O}}}(t)], \quad (4.9)$$

其中 $\mathbb{E}_{\hat{\mathbf{U}}_t | \vec{\mathbf{O}}}$ 表示对被平滑估计出的未知测量 $\hat{\mathbf{U}}_t$ 求平均. 由此, 过去和未来的测量信息都被利用到, 并且估计出的量子态 $\rho_S(t)$ 具有物理意义. 此类工作证明了由量子平滑得到的量子态具有更高的纯度, 并且研究了对于未知量子观测的前期假设 (如对未知测量算子参数的相关假设) 对估计结果的影响.

量子滤波中存在的挑战性的问题之一是连续变量量子系统滤波器的降维, 即量子系统维数较大的情形下, 对量子状态的实时滤波计算成本过高, 此时可将高维数问题进行低维数近似计算 [95, 96]. 此外还有按需量子反馈控制中的量子滤波设计和相干量子滤波/不基于量子测量的滤波等问题 [244]. 对于复杂量子系统 (如量子网络) 的滤波问题, 可以通过 $\{S, L, H\}$ 语言对系统的每个模块建模然后进行模块之间的连接, 如串联和并联等. 在此模型基础上可以套用经典的量子滤波方法 [103]. 而对于量子平滑, 主要问题在于如何解释将经典平滑理论直接应用于量子系统得到的弱值的物理意义. 目前提出的不同量子平滑理论有其各自的视角和假设, 但并没有一个统一并被广泛接受的量子平滑理论. 此外, 对于经典 - 量子混合系统, 即系统中同时存在经典变量和量子变量, 其混合量子平滑滤波也是值得研究的问题.

4.2 量子噪声谱学

考虑一个感兴趣的量子系统 S , 为了更全面地刻画系统的动力学演化过程, 一类广泛的量子系统信号估计或量子传感模型从 S 上的 Hamilton 量 $H(t)$ 出发, 有

$$H(t) = H_{\text{int}} + H_{\text{ctrl}}(t) + H_{\text{signal}}(t), \quad (4.10)$$

其中, H_{int} 为系统内部 Hamilton 量, 通常假设为静态本底成分; $H_{\text{ctrl}}(t)$ 为人工施加的外部控制场, 其具体形式取决于物理系统及控制方式; $H_{\text{signal}}(t)$ 为需要估计的感兴趣的信号 Hamilton 量, 可在一组合适的算子基 $\{H_i\}$ 下展开为

$$H_{\text{signal}}(t) = \sum_i \beta_i(t) H_i. \quad (4.11)$$

部分研究集中于未知信号为确定性信号的情形 [214, 261, 289], 则常有

$$\beta_i(t) = \sum_j \beta_{i,j} \cos(2\pi f_j t + \phi_j), \quad (4.12)$$

其中 $\beta_{i,j}$ 、 f_j 和 ϕ_j 为未知或部分未知的待估计标量信号. 估计确定性信号的相关研究可参见文献 [69]. 相较而言, 随机信号模型 (即 $\beta_i(t)$ 为未知随机过程, 尤其是非 Markov 过程 [142], 因为 Markov 过程模

型不足以完全描述或解释当前量子设备展现的动力学特征^[28, 197, 255]能够带来更丰富的系统与环境信息以及更广泛的应用, 因此本节主要介绍随机信号的情形.

参数 $\beta_i(t)$ 的随机性主要来自于外部环境 (又称 bath) 的干扰^[116, 295]及系统建模的不精确等因素^[67, 114], 因此其也被称为噪声. 对单比特系统, 当 $H_i \not\propto \sigma_z$ 时, 相应的随机项会导致系统状态在 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 之间的转移 (Bloch 表象下为状态纬度的变化), 这种量子信息的丢失在核磁共振 (nuclear magnetic resonance, NMR) 中被称为 T_1 过程^[240]; 反之, 当 $H_i \propto \sigma_z$ 时, 相应的随机项引起的是系统两个基准态的叠加的相位信息而非幅值信息的丢失, 这在 NMR 中被称为 T_2/T_2^* 过程. 相位信息的丢失 (Bloch 表象下为状态经度的变化) 又称为退相位 (dephasing), 因此纯退相位模型即为

$$H_{\text{signal}}(t) = \beta(t)\sigma_z. \quad (4.13)$$

方程 (4.10) 以及利用经典随机过程对其的展开和解释 (如 (4.13)), 统称为半经典 (semi-classical) 模型^[26, 273], 因为其中环境的部分仍然是被经典随机过程而非量子力学模型表示的, 相应环境/噪声称为经典环境/噪声. 完整的量子力学模型^[242]需要从系统 S 和外部环境 E 构成的整体出发, 考虑其上的 Hamilton 量形如

$$H_{\text{all}} = H_S \otimes I_E + I_S \otimes H_E + H_{SE}, \quad (4.14)$$

其中, H_S/H_E 是系统/环境上的 Hamilton 量, H_{SE} 表示系统与环境的相互作用. 通过对环境取偏迹可以将量子力学模型约化成半经典模型, 但存在一些物理现象只能用前者而非后者解释, 进一步综述可参见文献^[225]. 本节为了便于读者理解, 主要从半经典模型出发介绍谱函数等概念.

令 $\langle \cdot \rangle$ 表示随机过程的期望. 若考虑平稳、零均值的 Gauss 过程, 则其统计性质完全由功率谱密度

$$S(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} \langle \beta(t+\tau)\beta(t) \rangle d\tau \quad (4.15)$$

决定. 量子噪声谱学即为通过设计合适的系统初态与控制作用 $H_{\text{ctrl}}(t)$ 并对系统进行测量提取信息以重构出噪声谱 $S(\omega)$ 的技术. 根据文献^[177]中的总结, 其典型流程如下:

- (1) 选取一个合适的量子系统作为探测环境信息的探针或传感器 (如果系统退化为经典系统, 则一般不适合被称为“量子”噪声谱学);
- (2) 制备探针于一个已知的初始状态;
- (3) 令探针在环境噪声及已知的控制序列影响下演化;
- (4) 测量一个可观测量 (注意这里一般测量探针系统, 区别于图 3 量子滤波中测量的是环境);
- (5) 对不同的初态、受控演化或可观测量重复步骤 (1)–(4), 收集测量数据;
- (6) 处理数据以生成对噪声功率谱密度函数的估计结果.

根据所采用的物理原理或信号处理技术的差异, 量子噪声谱学包含一系列具体方法, 下面重点介绍其中的滤波函数法 (filter function method/formalism).

4.2.1 滤波函数法

20 世纪 50 年代起, 核磁共振领域开始采用控制脉冲 (如自旋回波 (spin/Hahn echo)^[111]等) 消减量子系统所受到的噪声影响, 以达到抑制退相干 (环境引起的量子系统相干性的流逝) 的效果^[217]. 这些早期工作在文献^[242, 243]中被以量子信息视角重新梳理与推广, 发展成著名的动态解耦/动力学解

耦 (dynamical decoupling) 技术以系统性保护量子系统的信息, 并随后启发了基于滤波函数框架的量子噪声谱学的建立.

本文以单比特退相位模型 (4.13) 为例阐述动态解耦及滤波函数框架. 在最简单的非平凡例子中, 假设内部 Hamilton 量 $H_{\text{int}} = 0$, 控制作用 $H_{\text{ctrl}}(t) = \sum_{k=1}^{n-1} \frac{\pi}{2} \delta(t - t_k) \sigma_y$ 为一系列施加在 t_k 时刻、幅值为 π 的绕 σ_y 轴的脉冲, 其中“幅值”乘了 2 倍是为了匹配 Bloch 表象下的角度.

设系统初态为 $\rho(0) = (I + \sigma_y)/2$, 在终止时刻 T 测量可观测量 Y . 人们期望的理想情形是环境噪声对量子系统的影响趋近于 0, 即系统 S 近乎被“冻结”、 $\langle Y(T) \rangle$ 尽可能接近 $\langle Y(0) \rangle = 1$. 转移至关于控制作用 $H_{\text{ctrl}}(t)$ 的相互作用绘景下, 则可观测量 Y 不变 (设 n 为奇数, 否则在 T 时刻测量前添加一个脉冲即可), 系统 Hamilton 量变为所谓“翻转框架 (toggling frame)” Hamilton 量

$$H_I(t) = y(t)\beta(t)\sigma_z, \quad (4.16)$$

其中 $y(t)$ 称为切换函数 (switching function), 初始值为 1, 在每个 π 脉冲施加的时刻 $y(t)$ 的值从 $+1$ (-1) 跳变到 -1 ($+1$), 如图 4(a) 中的 3 个例子所示.

系统的状态演化服从

$$\rho(T) = U(T)\rho(0)U^\dagger(T), \quad (4.17)$$

其中由于 $H_I(t)$ 在不同时刻对易, 所以有 $U(T) = \exp[-i \int_0^T H_I(t) dt]$. 可观测量期望值为

$$\langle Y(T) \rangle = \text{Tr}[\rho(T)Y] = \langle \cos \phi(T) \rangle, \quad (4.18)$$

其中 $\phi(T) = 2 \int_0^T y(t)\beta(t) dt$. 应用累积量^[140] (量子版本的推广参见文献 [186]) 展开, 假设噪声是零均值、平稳 Gauss 的, 则有

$$\langle Y(T) \rangle = \exp \left(- \frac{\langle \phi(T)^2 \rangle}{2} \right). \quad (4.19)$$

因此, $\langle \phi(T)^2 \rangle$ 越大, $\langle Y(T) \rangle$ 越接近 0, 量子信息丢失得越多.

不施加控制的情形又称为自由演化 (free evolution, 即 $y(t) \equiv 1$), 此时 $\langle \phi(T)^2 \rangle$ 在实际系统中一般随 T 的增加而增大, 即系统演化一定时间后退相干会导致量子信息的丢失. 这可能显著阻碍量子计算等领域的发展, 因为量子门电路的施行需要消耗一定时间. 然而, 控制脉冲的引入可能减慢退相干进行的速度, 延长系统信息保存的时间. 从时域角度直观地考虑, 在 $\beta(t) \equiv \beta$ 的极端静态场景, 经历偶数个等间距 π 脉冲后, $\phi(T) = 0$ 和噪声的影响被完全消除. 因此, 如果 $y(t)$ 的切换周期远远小于 $\beta(t)$ 的时间尺度, 则 $\langle \phi(T)^2 \rangle$ 可以足够小^[243]. 这在频域更加清楚: 令 $F(\omega, t) \triangleq \int_0^t y(s)e^{i\omega s} ds$, 则

$$\langle \phi(T)^2 \rangle = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty S(\omega) |F(\omega, T)|^2 d\omega, \quad (4.20)$$

即 $|F(\omega, T)|^2$ 的作用类似信号处理中的滤波函数^[26, 68], 其与谱函数的重叠积分值越大, 退相干越严重. 自由演化对应的滤波函数如图 4(b) 中绿色曲线所示, 可能与谱曲线 (图 4(b) 和 4(c) 中的灰色曲线为一示例) 有较大的重叠积分值; 而精心设计后的非平凡的 $y(t)$ 对应的滤波函数通过重整曲线形状、改变峰值位置, 可降低与谱曲线的重叠积分值, 达到抑制退相干的效果, 相应的技术称为动态解耦. 除了 NMR 领域熟知的解耦序列自旋回波^[111] (图 4(b) 中蓝色曲线) 和 CPMG (Carr-Purcell-Meiboom-Gill)^[47, 162] 等以外, 新的解耦序列如 CDD (concatenated dynamical decoupling)^[132, 133] 和 UDD (Uhrig

dynamical decoupling)^[238,239] 等被设计开发并得到深入研究^[273], 并随后发展出更丰富的解耦序列构造技术^[186,189]. 在解耦序列优化^[183]、脉冲误差影响的降低、序列鲁棒性增强等方面也存在大量研究, 更进一步的综述可参见文献^[225].

滤波函数框架是经典信号处理理论在量子科研领域的一次成功应用, 其不仅能够指导解耦脉冲序列的设计, 而且直观展示了利用动态解耦进行噪声谱估计的几何意义. 假设长度为 L_0 的一段基本脉冲序列被在时间轴接连重复施加了 M 次, 则当 $M \rightarrow \infty$ 时其生成的滤波函数 $|F(\omega, ML_0)|$ 趋向于一列峰值在 $\omega = 2\pi k/L_0$ ($k \in \mathbb{N}_+$)、幅值随 ω 增大而衰减的 Dirac δ 函数列^[5,10,280], 如图 4(c) 中红色曲线示例, 其绘制出了前两个 δ 函数. 定义 $\omega_0 \triangleq 2\pi/L_0$, 则 (4.20) 实际给出了对谱函数 $S(\omega)$ 在谐波频率 $k\omega_0$ 处的采样值加权, 即为关于 $S(k\omega_0)$ 的线性方程. 通过生成不同的滤波函数改变权重值, 可将单个方程扩展为线性方程组, 最后利用谱衰减和高频截断等先验信息求解方程组, 即可重构出谱函数在谐波频率处的值. 鉴于所生成滤波函数的几何形状, 该方法又称为频率梳法 (frequency comb method), 后被进一步推广至非 Gauss 噪声^[178]、多比特^[188] 和多轴^[187] 等场景, 相关进展更详细的综述可见文献^[226].

此外, 为了处理谱泄露与频率混叠等问题, 离散长球序列 (discrete prolate spheroidal sequences, 又称 Slepian 序列) 被文献^[177] 引入含乘性噪声的场景以构造频域集中的滤波函数和提高谱估计准确性. Bayes 推断方法被文献^[86] 系统性地引入以允许使用更广泛形式的先验信息和脉冲序列估计噪声谱.

4.2.2 其他方法

本小节简要介绍不同于滤波函数框架的量子噪声谱估计方案.

弛豫测量法 (relaxometry) 基于一阶微扰论 (因此需要假设噪声强度足够弱, 即弱耦合 (weak coupling)) 及 Fermi 黄金定则建立了量子比特在不同能级间的跃迁速率与噪声谱函数在对应能级裂距的

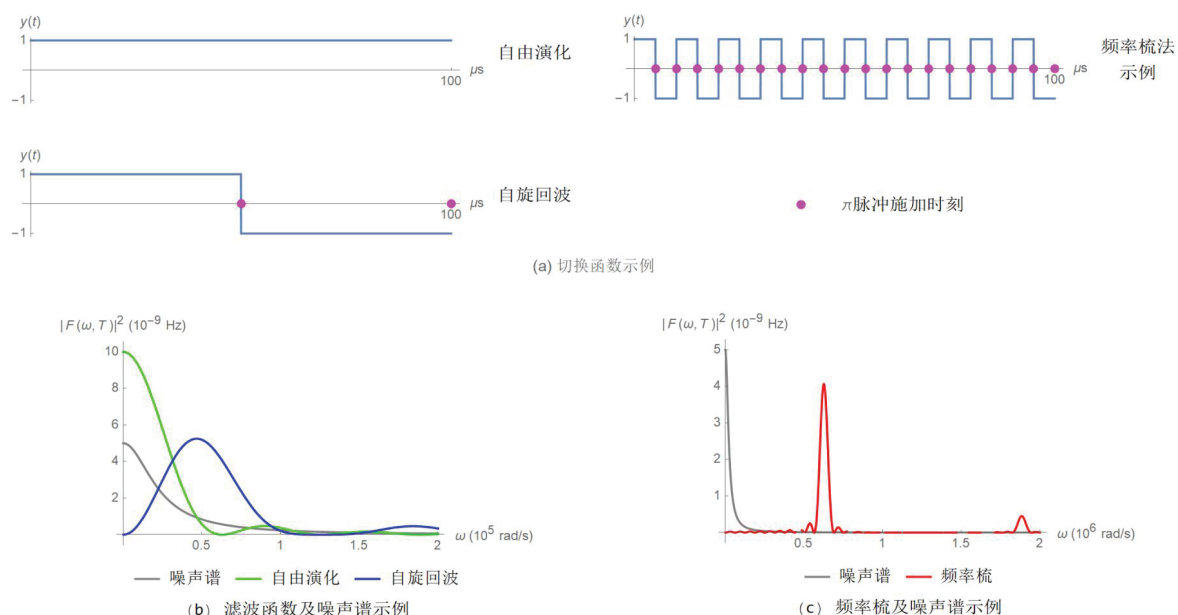


图 4 切换函数、滤波函数、噪声谱函数示例

频率处的值的正比关联, 因此对能量弛豫进行测量即可重构出谱函数^[213], 进一步综述可参见文献 [69].

信号处理中的周期图法 (periodogram) 也被用于估计噪声谱函数^[25, 208, 271], 其典型流程为: 对系统周期性地重复 Ramsey 实验 (含测量), 对测量得到的每条二值时间序列进行 Fourier 变换, 再对所得到的多条重构谱曲线取平均即得最终估计结果.

自旋噪声谱技术可认为是系综版本的噪声谱技术, 其典型方案为利用基于 Faraday 旋转的光谱技术探测原子系综的自旋噪声, 发展丰富, 应用广泛, 相关综述可参见文献 [172, 216].

机器学习技术在近些年逐渐被引入量子噪声谱学. 文献 [275] 展示了如何利用机器学习中的工具估计开放量子系统的动力学, 包括噪声谱等指标; 文献 [160, 258] 展示了神经网络方法 (不考虑其在训练阶段的可能的资源消耗) 在噪声谱估计方面可以比频率梳法消耗更少的实验资源; 文献 [283] 引入神经网络、利用随机基准测试 (randomized benchmarking) 生成的数据重构 $1/f$ 噪声谱; 在 NMR 领域, 深度学习已被应用于解决谱估计问题, 如文献 [3, 137].

从更广泛的角度看, 谱函数仅是噪声的关联函数在频域的表象, 但对非 Markov 噪声的刻画并不必然总要局限于频域. 文献 [52] 引入框架理论 (frame theory), 建立了一套一般的噪声表示论, 涵盖频域表象为特例、允许灵活的表象构建以适应控制作用的特点, 并被文献 [77] 展现了其在非 Gauss 噪声刻画方面的效率优势; 文献 [84, 149, 159] 利用机器学习的工具对开放量子系统的非 Markov 动力学进行了研究; 如果将噪声关联函数视为研究量子系统非 Markov 演化的一个角度, 则过程张量层析提供了另一种更一般性的视角和技术^[195, 256], 但相应的资源消耗与计算复杂度也更高.

4.2.3 应用与总结

量子噪声谱估计技术已经实现于诸多物理体系, 如超导^[43]、离子阱^[138]、金刚烷^[10]、冷原子^[7] 和 NV 色心^[19, 205] 等. 基于噪声谱估计结果, 可以以一定精度预测系统的受控动力学演化结果^[118, 219]; 进一步的典型应用是, 根据所估计的谱曲线优化控制脉冲, 使得系统的相干时间被尽可能增大以延长量子信息的存储, 或者极小化噪声对量子门的影响, 如文献 [43, 205, 251] 等实验所示; 对噪声的刻画还可能有助于减少其在量子精密测量中的负面影响^[20, 138]; 另外, 还可以辅助分析噪声来源 (从而可能潜在地促进设备材料制造工艺的改善等)^[19, 53, 171, 274]; 以此为理论基础应用于自旋比特系统, 可以完成多种微尺度、高灵敏度的探测和传感任务, 如在 NMR 领域的应用^[148, 222].

总的来说, 量子噪声谱学目前仍在发展阶段. 虽然对多轴和非 Gauss 等更复杂的噪声类型均有研究, 但尚缺乏整合, 对复杂类型噪声谱的完全解析还远没有实现. 从方法论的角度, 机器学习在噪声谱估计中的应用在近些年刚刚起步, 其优势仍然需要探索. 要将量子噪声谱学发展成一个成熟的方向或工具以促进量子系统科学的进步, 还有很多工作等待开展.

5 结论和展望

本文主要介绍了量子系统辨识与参数估计这一方向下的量子度量、量子层析、量子滤波和量子噪声谱估计 4 个子课题. 该方向下还存在若干其他子课题, 由于尚不够成熟或者已有相关综述而未能在此加以详细介绍, 如非 Hermite 系统的参数估计^[16, 17, 161, 278, 292]、连续观测的量子输入输出系统 (quantum input-output systems) 的辨识与参数估计^[179]、基于弱值的量子度量和量子层析^[266] 等, 疏漏之处还望读者海涵.

当前的量子系统辨识与参数估计领域存在若干有待进一步解决的难点. 首先, 量子度量学作为参数估计精度极限的刻画工具, 理应在层析和滤波等具体任务中发挥更基本的作用及建立更密切的联系. 但目前由于多参数估计最优测量的不相容性、实际系统限制条件等因素, 量子度量本身尚存在大量未解决的开放问题, 间接限制了其他子问题在相关方面的深入发展. 其次, 量子科技的一个长期且普遍存在的问题即为高复杂度问题, 这不仅表现为感兴趣的量子系统的维数常随基本信息单元 (量子比特) 个数的增长而指数增长, 而且表现为不感兴趣的量子系统 (如环境) 的干扰或影响易具备复杂特性, 从而为系统辨识与参数估计带来巨大的负担与障碍. 最后, 机器学习乃至人工智能目前正在飞速发展, 已经或有望为信息技术的各领域带来改变甚至变革, 而其对量子系统辨识与参数估计的影响尚不完全明晰, 需要深化研究^[76]. 反之, 以上这些难点也将是未来的量子系统辨识与参数估计的重要发展方向.

从更一般的角度看, 辨识与估计的目的不仅是为了深入认识、了解系统, 很多情形下也是为了更好地调控系统. 因此, 量子系统辨识与参数估计和具体的量子控制目标的关系不可忽略, 前者的进展有助于后者更顺利、更高性能的达成, 后者中的许多具体需求可能会为前者源源不断地提供新的分析视角与研究课题. 二者相辅相成, 有望共同促进量子信息科学技术的发展与成熟.

致谢 作者王元龙向中国科学院数学与系统科学研究院的赵文斌研究员和齐波副研究员在本文准备过程中给予的帮助表示感谢.

参考文献

- 1 Aaronson S. Shadow tomography of quantum states. *SIAM J Comput*, 2020, 49: STOC18-368
- 2 Aasi J, Abadie J, Abbott B P, et al. Enhanced sensitivity of the LIGO gravitational wave detector by using squeezed states of light. *Nat Photon*, 2013, 7: 613–619
- 3 Aharon N, Rotem A, McGuinness L P, et al. NV center based nano-NMR enhanced by deep learning. *Sci Rep*, 2019, 9: 17802
- 4 Ahmed S, Sánchez Muñoz C, Nori F, et al. Quantum state tomography with conditional generative adversarial networks. *Phys Rev Lett*, 2021, 127: 140502
- 5 Ajoy A, Álvarez G A, Suter D. Optimal pulse spacing for dynamical decoupling in the presence of a purely dephasing spin bath. *Phys Rev A*, 2011, 83: 032303
- 6 Alicki R, Lendi K. *Quantum Dynamical Semigroups and Applications*. Berlin-Heidelberg: Springer, 2007
- 7 Almog I, Sagi Y, Gordon G, et al. Direct measurement of the system-environment coupling as a tool for understanding decoherence and dynamical decoupling. *J Phys B At Mol Opt Phys*, 2011, 44: 154006
- 8 Altafini C, Ticozzi F. Modeling and control of quantum systems: An introduction. *IEEE Trans Automat Control*, 2012, 57: 1898–1917
- 9 Altepeter J B, Branning D, Jeffrey E, et al. Ancilla-assisted quantum process tomography. *Phys Rev Lett*, 2003, 90: 193601
- 10 Álvarez G A, Suter D. Measuring the spectrum of colored noise by dynamical decoupling. *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 230501
- 11 Anisimov P M, Raterman G M, Chiruvelli A, et al. Quantum metrology with two-mode squeezed vacuum: Parity detection beats the Heisenberg limit. *Phys Rev Lett*, 2010, 104: 103602
- 12 Anshu A, Arunachalam S, Kuwahara T, et al. Sample-efficient learning of interacting quantum systems. *Nature Phys*, 2021, 17: 931–935
- 13 Bădescu C, O'Donnell R. Improved quantum data analysis. In: *Proceedings of the 53rd Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*. New York: Association for Computing Machinery, 2021, 1398–1411
- 14 Baldwin C H, Kalev A, Deutsch I H. Quantum process tomography of unitary and near-unitary maps. *Phys Rev A*, 2014, 90: 012110
- 15 Banchi L, Grant E, Rocchetto A, et al. Modelling non-Markovian quantum processes with recurrent neural networks. *New J Phys*, 2018, 20: 123030
- 16 Bao L, Qi B, Dong D. Exponentially enhanced quantum non-Hermitian sensing via optimized coherent drive. *Phys Rev Appl*, 2022, 17: 014034
- 17 Bao L, Qi B, Dong D, et al. Fundamental limits for reciprocal and nonreciprocal non-Hermitian quantum sensing. *Phys Rev A*, 2021, 103: 042418

- 18 Bao L, Qi B, Wang Y, et al. Multi-channel quantum parameter estimation. *Sci China Inf Sci*, 2022, 65: 200505
- 19 Bar-Gill N, Pham L M, Belthangady C, et al. Suppression of spin-bath dynamics for improved coherence of multi-spin-qubit systems. *Nat Commun*, 2012, 3: 858
- 20 Beaudoin F, Norris L M, Viola L. Ramsey interferometry in correlated quantum noise environments. *Phys Rev A*, 2018, 98: 020102
- 21 Belavkin V P. Quantum stochastic calculus and quantum nonlinear filtering. *J Multivariate Anal*, 1992, 42: 171–201
- 22 Belavkin V P. Quantum diffusion, measurement and filtering I. *Theory Probab Appl*, 1994, 38: 573–585
- 23 Belavkin V P. Quantum filtering of Markov signals with white quantum noise. In: *Quantum Communications and Measurement*. Boston: Springer, 1995, 381–391
- 24 Belavkin V P. Measurement, filtering and control in quantum open dynamical systems. *Rep Math Phys*, 1999, 43: A405–A425
- 25 Bialczak R C, McDermott R, Ansmann M, et al. $1/f$ flux noise in Josephson phase qubits. *Phys Rev Lett*, 2007, 99: 187006
- 26 Biercuk M J, Doherty A C, Uys H. Dynamical decoupling sequence construction as a filter-design problem. *J Phys B At Mol Opt Phys*, 2011, 44: 154002
- 27 Blair D, Ju L, Zhao C N, et al. Gravitational wave astronomy: The current status. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2015, 58: 120402
- 28 Blume-Kohout R, Gamble J K, Nielsen E, et al. Demonstration of qubit operations below a rigorous fault tolerance threshold with gate set tomography. *Nat Commun*, 2017, 8: 14485
- 29 Boixo S, Flammia S T, Caves C M, et al. Generalized limits for single-parameter quantum estimation. *Phys Rev Lett*, 2007, 98: 090401
- 30 Bongioanni I, Sansoni L, Sciarrino F, et al. Experimental quantum process tomography of non-trace-preserving maps. *Phys Rev A*, 2010, 82: 042307
- 31 Bouten L, van Handel R, James M R. An introduction to quantum filtering. *SIAM J Control Optim*, 2007, 46: 2199–2241
- 32 Bouten L, van Handel R, James M R. A discrete invitation to quantum filtering and feedback control. *SIAM Rev*, 2009, 51: 239–316
- 33 Boyd S, Vandenberghe L. *Convex Optimization*. Cambridge: Cambridge Univ Press, 2004
- 34 Braccia P, Banchi L, Caruso F. Quantum noise sensing by generating fake noise. *Phys Rev Appl*, 2022, 17: 024002
- 35 Brask J B, Chaves R, Kołodyński J. Improved quantum magnetometry beyond the standard quantum limit. *Phys Rev X*, 2015, 5: 031010
- 36 Braun D, Adesso G, Benatti F, et al. Quantum-enhanced measurements without entanglement. *Rev Modern Phys*, 2018, 90: 035006
- 37 Breuer H P. Genuine quantum trajectories for non-Markovian processes. *Phys Rev A*, 2004, 70: 012106
- 38 Breuer H P, Laine E M, Piilo J, et al. Colloquium: Non-Markovian dynamics in open quantum systems. *Rev Modern Phys*, 2016, 88: 021002
- 39 Breuer H P, Petruccione F. *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford: Oxford Univ Press, 2002
- 40 Brif C, Chakrabarti R, Rabitz H. Control of quantum phenomena: Past, present and future. *New J Phys*, 2010, 12: 075008
- 41 Burgarth D, Yuasa K. Quantum system identification. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 080502
- 42 Bužek V, Derka R, Massar S. Optimal quantum clocks. *Phys Rev Lett*, 1999, 82: 2207–2210
- 43 Bylander J, Gustavsson S, Yan F, et al. Noise spectroscopy through dynamical decoupling with a superconducting flux qubit. *Nature Phys*, 2011, 7: 565–570
- 44 Cai Y, Roslund J, Thiel V, et al. Quantum enhanced measurement of an optical frequency comb. *npj Quantum Inf*, 2021, 7: 82
- 45 Carmichael H J. Quantum trajectory theory for cascaded open systems. *Phys Rev Lett*, 1993, 70: 2273–2276
- 46 Carmichael H J. *An Open Systems Approach to Quantum Optics*. Heidelberg-Berlin: Springer, 1993
- 47 Carr H Y, Purcell E M. Effects of diffusion on free precession in nuclear magnetic resonance experiments. *Phys Rev*, 1954, 94: 630–638
- 48 Carrasquilla J, Torlai G, Melko R G, et al. Reconstructing quantum states with generative models. *Nat Mach Intell*, 2019, 1: 155–161
- 49 Casacio C A, Madsen L S, Terrasson A, et al. Quantum-enhanced nonlinear microscopy. *Nature*, 2021, 594: 201–206
- 50 Cattaneo M, Giorgi G L, Maniscalco S, et al. Symmetry and block structure of the Liouvillian superoperator in partial secular approximation. *Phys Rev A*, 2020, 101: 042108
- 51 Caves C M. Quantum-mechanical noise in an interferometer. *Phys Rev D*, 1981, 23: 1693–1708

- 52 Chalermputitarak T, Tonekaboni B, Wang Y, et al. Frame-based filter-function formalism for quantum characterization and control. *PRX Quantum*, 2021, 2: 030315
- 53 Chan K W, Huang W, Yang C H, et al. Assessment of a silicon quantum dot spin qubit environment via noise spectroscopy. *Phys Rev Appl*, 2018, 10: 044017
- 54 Chantasri A, Guevara I, Laverick K T, et al. Unifying theory of quantum state estimation using past and future information. *Phys Rep*, 2021, 930: 1–40
- 55 Chantasri A, Guevara I, Wiseman H M. Quantum state smoothing: Why the types of observed and unobserved measurements matter. *New J Phys*, 2019, 21: 083039
- 56 Chapman R J, Ferrie C, Peruzzo A. Experimental demonstration of self-guided quantum tomography. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 040402
- 57 Che L, Wei C, Huang Y, et al. Learning quantum Hamiltonians from single-qubit measurements. *Phys Rev Res*, 2021, 3: 023246
- 58 Choi M D. Completely positive linear maps on complex matrices. *Linear Algebra Appl*, 1975, 10: 285–290
- 59 Combes J, Wiseman H M, Scott A J. Replacing quantum feedback with open-loop control and quantum filtering. *Phys Rev A*, 2010, 81: 020301
- 60 Cong S, Kuang S. Review of state estimation methods in quantum systems (in Chinese). *Control and Decision*, 2008, 23: 121–126 [丛爽, 匡森. 量子系统中状态估计方法的综述. *控制与决策*, 2008, 23: 121–126]
- 61 Correa L A, Mehboudi M, Adesso G, et al. Individual quantum probes for optimal thermometry. *Phys Rev Lett*, 2015, 114: 220405
- 62 Cramér H. *Mathematical Methods of Statistics*. Princeton: Princeton Univ Press, 1946
- 63 Cramer M, Plenio M B, Flammia S T, et al. Efficient quantum state tomography. *Nat Commun*, 2010, 1: 149
- 64 D'Alessandro D. *Introduction to Quantum Control and Dynamics*, 2nd ed. New York: CRC Press, 2021
- 65 D'Ariano G M, Paris M G A. Adaptive quantum homodyne tomography. *Phys Rev A*, 1999, 60: 518–528
- 66 de Burgh M D, Langford N K, Doherty A C, et al. Choice of measurement sets in qubit tomography. *Phys Rev A*, 2008, 78: 052122
- 67 De Chiara G, Rossini D, Montangero S, et al. From perfect to fractal transmission in spin chains. *Phys Rev A*, 2005, 72: 012323
- 68 De Sousa R. Electron spin as a spectrometer of nuclear-spin noise and other fluctuations. In: *Electron Spin Resonance and Related Phenomena in Low-Dimensional Structures*. Berlin-Heidelberg: Springer, 2009, 183–220
- 69 Degen C L, Reinhard F, Cappellaro P. Quantum sensing. *Rev Modern Phys*, 2017, 89: 035002
- 70 Demkowicz-Dobrzański R, Górecki W, Guţă M. Multi-parameter estimation beyond quantum Fisher information. *J Phys A*, 2020, 53: 363001
- 71 Demkowicz-Dobrzański R, Jarzyna M, Kołodyński J. Quantum limits in optical interferometry. *Prog Opt*, 2015, 60: 345–435
- 72 Derevianko A, Katori H. Colloquium: Physics of optical lattice clocks. *Rev Modern Phys*, 2011, 83: 331–347
- 73 DiVincenzo D P. Quantum computation. *Science*, 1995, 270: 255–261
- 74 Petersen I R, Dong D. Quantum control theory and applications: A survey. *IET Control Theory Appl*, 2010, 4: 2651–2671
- 75 Dong D, Petersen I R. Quantum estimation, control and learning: Opportunities and challenges. *Ann Rev Control*, 2022, 54: 243–251
- 76 Dong D, Petersen I R. *Learning and Robust Control in Quantum Technology*. Cham: Springer, 2023
- 77 Dong W, Paz-Silva G A, Viola L. Resource-efficient digital characterization and control of classical non-Gaussian noise. *Appl Phys Lett*, 2023, 122: 244001
- 78 Dong Z, Zhang G, Amini N H. Quantum filtering for a two-level atom driven by two counter-propagating photons. *Quantum Inf Process*, 2019, 18: 136
- 79 Dowling J P. Correlated input-port, matter-wave interferometer: Quantum-noise limits to the atom-laser gyroscope. *Phys Rev A*, 1998, 57: 4736–4746
- 80 Dowling J P. Quantum optical metrology—The lowdown on high-N00N states. *Contemp Phys*, 2008, 49: 125–143
- 81 Dowling J P, Seshadreesan K P. Quantum optical technologies for metrology, sensing, and imaging. *J Lightwave Technol*, 2015, 33: 2359–2370
- 82 Escher B M, de Matos Filho R L, Davidovich L. Quantum metrology for noisy systems. *Braz J Phys*, 2011, 41: 229–247
- 83 Escher B M, de Matos Filho R L, Davidovich L. General framework for estimating the ultimate precision limit in noisy quantum-enhanced metrology. *Nature Phys*, 2011, 7: 406–411
- 84 Fanchini F F, Karpat G, Rossatto D Z, et al. Estimating the degree of non-Markovianity using machine learning.

- Phys Rev A, 2021, 103: 022425
- 85 Ferrie C. Self-guided quantum tomography. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 190404
- 86 Ferrie C, Granade C, Paz-Silva G, et al. Bayesian quantum noise spectroscopy. *New J Phys*, 2018, 20: 123005
- 87 Feynman R P. Simulating physics with computers. *Internat J Theoret Phys*, 1982, 21: 467–488
- 88 Fisher R A. On the mathematical foundations of theoretical statistics. *Philos Trans R Soc Lond Ser A Math Phys Eng Sci*, 1922, 222: 309–368
- 89 Fisher R A. Theory of statistical estimation. *Math Proc Cambridge Philos Soc*, 1925, 22: 700–725
- 90 Fiurášek J. Maximum-likelihood estimation of quantum measurement. *Phys Rev A*, 2001, 64: 024102
- 91 Fiurášek J, Hradil Z. Maximum-likelihood estimation of quantum processes. *Phys Rev A*, 2001, 63: 020101
- 92 Flammia S T, Gross D, Liu Y K, et al. Quantum tomography via compressed sensing: Error bounds, sample complexity and efficient estimators. *New J Phys*, 2012, 14: 095022
- 93 Gammelmark S, Julsgaard B, Mølmer K. Past quantum states of a monitored system. *Phys Rev Lett*, 2013, 111: 160401
- 94 Gao Q, Dong D, Petersen I R. Fault tolerant quantum filtering and fault detection for quantum systems. *Automatica*, 2016, 71: 125–134
- 95 Gao Q, Dong D, Petersen I R, et al. Design of a quantum projection filter. *IEEE Trans Automat Control*, 2020, 65: 3693–3700
- 96 Gao Q, Zhang G, Petersen I R. An improved quantum projection filter. *Automatica*, 2020, 112: 108716
- 97 Gebhart V, Santagati R, Gentile A A, et al. Learning quantum systems. *Nat Rev Phys*, 2023, 5: 141–156
- 98 Gentile A A, Flynn B, Knauer S, et al. Learning models of quantum systems from experiments. *Nature Phys*, 2021, 17: 837–843
- 99 Gill R D, Massar S. State estimation for large ensembles. *Phys Rev A*, 2000, 61: 042312
- 100 Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L. Quantum metrology. *Phys Rev Lett*, 2006, 96: 010401
- 101 Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L. Advances in quantum metrology. *Nat Photonic*, 2011, 5: 222–229
- 102 Gisin N, Thew R. Quantum communication. *Nat Photonic*, 2007, 1: 165–171
- 103 Gough J, James M R. The series product and its application to quantum feedforward and feedback networks. *IEEE Trans Automat Control*, 2009, 54: 2530–2544
- 104 Gough J, James M R, Nurdin H. Quantum master equation and filter for systems driven by fields in a single photon state. In: *Proceedings of the 50th IEEE Conference on Decision and Control and European Control Conference*. New York: Curran Associates, 2011, 5570–5576
- 105 Gough J E, James M R, Nurdin H I. Quantum filtering for systems driven by fields in single photon states and superposition of coherent states using non-Markovian embeddings. *Quantum Inf Process*, 2013, 12: 1469–1499
- 106 Grandi S, Zavatta A, Bellini M, et al. Experimental quantum tomography of a homodyne detector. *New J Phys*, 2017, 19: 053015
- 107 Grant M, Boyd S. CVX: Matlab software for disciplined convex programming, version 2.1. [Http://cvxr.com/cvx](http://cvxr.com/cvx), 2014
- 108 Gross D, Liu Y K, Flammia S T, et al. Quantum state tomography via compressed sensing. *Phys Rev Lett*, 2010, 105: 150401
- 109 Grote H, Danzmann K, Dooley K L, et al. First long-term application of squeezed states of light in a gravitational-wave observatory. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 181101
- 110 Guevara I, Wiseman H. Quantum state smoothing. *Phys Rev Lett*, 2015, 115: 180407
- 111 Hahn E L. Spin echoes. *Phys Rev*, 1950, 80: 580–594
- 112 Haine S A. Mean-field dynamics and fisher information in matter wave interferometry. *Phys Rev Lett*, 2016, 116: 230404
- 113 Hall M J W, Wiseman H M. Does nonlinear metrology offer improved resolution? Answers from quantum information theory. *Phys Rev X*, 2012, 2: 041006
- 114 Hauke P, Cucchietti F M, Tagliacozzo L, et al. Can one trust quantum simulators? *Rep Progr Phys*, 2012, 75: 082401
- 115 Hayashi M. A linear programming approach to attainable Cramér-Rao type bounds. In: *Quantum Communication, Computing, and Measurement*. Boston: Springer, 1997, 99–108
- 116 Hayashi T, Fujisawa T, Cheong H D, et al. Coherent manipulation of electronic states in a double quantum dot. *Phys Rev Lett*, 2003, 91: 226804
- 117 Helstrom C W. Minimum mean-squared error of estimates in quantum statistics. *Phys Lett A*, 1967, 25: 101–102
- 118 Hernández-Gómez S, Poggiali F, Cappellaro P, et al. Noise spectroscopy of a quantum-classical environment with a diamond qubit. *Phys Rev B*, 2018, 98: 214307
- 119 Higgins B L, Berry D W, Bartlett S D, et al. Entanglement-free Heisenberg-limited phase estimation. *Nature*, 2007,

- 450: 393–396
- 120 Holland M J, Burnett K. Interferometric detection of optical phase shifts at the Heisenberg limit. *Phys Rev Lett*, 1993, 71: 1355–1358
 - 121 Hou S Y, Li H, Long G L. Experimental quantum Hamiltonian identification from measurement time traces. *Sci Bull*, 2017, 62: 863–868
 - 122 Hou Z, Zhong H S, Tian Y, et al. Full reconstruction of a 14-qubit state within four hours. *New J Phys*, 2016, 18: 083036
 - 123 Hou Z, Zhu H, Xiang G Y, et al. Achieving quantum precision limit in adaptive qubit state tomography. *npj Quantum Inf*, 2016, 2: 16001
 - 124 Hradil Z. Quantum-state estimation. *Phys Rev A*, 1997, 55: R1561–R1564
 - 125 Huang H Y, Kueng R, Preskill J. Predicting many properties of a quantum system from very few measurements. *Nature Phys*, 2020, 16: 1050–1057
 - 126 Huang J, Wu S, Zhong H, et al. Quantum metrology with cold atoms. In: *Annual Review of Cold Atoms and Molecules*. Singapore: World Scientific, 2014, 365–415
 - 127 Huang Z, Lupo C, Kok P. Quantum-limited estimation of range and velocity. *PRX Quantum*, 2021, 2: 030303
 - 128 Huelga S F, Macchiavello C, Pellizzari T, et al. Improvement of frequency standards with quantum entanglement. *Phys Rev Lett*, 1997, 79: 3865–3868
 - 129 Huszár F, Houlisby N M T. Adaptive Bayesian quantum tomography. *Phys Rev A*, 2012, 85: 052120
 - 130 Joas T, Schmitt S, Santagati R, et al. Online adaptive quantum characterization of a nuclear spin. *npj Quantum Inf*, 2021, 7: 56
 - 131 Kentaro O. Quantum smoother for open quantum systems driven by quantum jump-diffusion processes. *Proc ISCTE Internat Symp Stoch Syst Theory Appl*, 2018, 2018: 25–28
 - 132 Khodjasteh K, Lidar D A. Fault-tolerant quantum dynamical decoupling. *Phys Rev Lett*, 2005, 95: 180501
 - 133 Khodjasteh K, Lidar D A. Performance of deterministic dynamical decoupling schemes: Concatenated and periodic pulse sequences. *Phys Rev A*, 2007, 75: 062310
 - 134 Knee G C, Bolduc E, Leach J, et al. Quantum process tomography via completely positive and trace-preserving projection. *Phys Rev A*, 2018, 98: 062336
 - 135 Kolobov M I. The spatial behavior of nonclassical light. *Rev Modern Phys*, 1999, 71: 1539–1589
 - 136 Kołodziej J, Demkowicz-Dobrzański R. Phase estimation without *a priori* phase knowledge in the presence of loss. *Phys Rev A*, 2010, 82: 053804
 - 137 Kong X, Zhou L, Li Z, et al. Artificial intelligence enhanced two-dimensional nanoscale nuclear magnetic resonance spectroscopy. *npj Quantum Inf*, 2020, 6: 79
 - 138 Kotler S, Akerman N, Glickman Y, et al. Single-ion quantum lock-in amplifier. *Nature*, 2011, 473: 61–65
 - 139 Kravtsov K S, Straupe S S, Radchenko I V, et al. Experimental adaptive Bayesian tomography. *Phys Rev A*, 2013, 87: 062122
 - 140 Kubo R. Generalized cumulant expansion method. *J Phys Soc Japan*, 1962, 17: 1100–1120
 - 141 Lanyon B P, Maier C, Holzäpfel M, et al. Efficient tomography of a quantum many-body system. *Nature Phys*, 2017, 13: 1158–1162
 - 142 Li L, Hall M J W, Wiseman H M. Concepts of quantum non-Markovianity: A hierarchy. *Phys Rep*, 2018, 759: 1–51
 - 143 Li N, Luo S. Entanglement detection via quantum Fisher information. *Phys Rev A*, 2013, 88: 014301
 - 144 LIGO Scientific Collaboration. A gravitational wave observatory operating beyond the quantum shot-noise limit. *Nature Phys*, 2011, 7: 962–965
 - 145 Liu J, Yuan H, Lu X M, et al. Quantum Fisher information matrix and multiparameter estimation. *J Phys A*, 2020, 53: 023001
 - 146 Liu J, Zhang M, Chen H, et al. Optimal scheme for quantum metrology. *Adv Quantum Tech*, 2022, 5: 2100080
 - 147 Löffberg J. YALMIP: A toolbox for modeling and optimization in MATLAB. In: *Proceedings of the CACSD Conference*. Piscataway: IEEE, 2004, 284–289
 - 148 Lovchinsky I, Sushkov A O, Urbach E, et al. Nuclear magnetic resonance detection and spectroscopy of single proteins using quantum logic. *Science*, 2016, 351: 836–841
 - 149 Luchnikov I A, Vintskevich S V, Grigoriev D A, et al. Machine learning non-Markovian quantum dynamics. *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 140502
 - 150 Ludlow A D, Boyd M M, Ye J, et al. Optical atomic clocks. *Rev Modern Phys*, 2015, 87: 637–701
 - 151 Lugiato L A, Gatti A, Brambilla E. Quantum imaging. *J Opt B Quantum Semiclass Opt*, 2002, 4: S176–S183
 - 152 Lundeen J S, Feito A, Coldenstrodt-Ronge H, et al. Tomography of quantum detectors. *Nature Phys*, 2009, 5: 27–30
 - 153 Luo S. Quantum Fisher information and uncertainty relations. *Lett Math Phys*, 2000, 53: 243–251

- 154 Lvovsky A I, Raymer M G. Continuous-variable optical quantum-state tomography. *Rev Modern Phys*, 2009, 81: 299–332
- 155 Ma H, Dong D, Petersen I R, et al. On how neural networks enhance quantum state tomography with constrained measurements. *arXiv:2111.09504*, 2021
- 156 Ma H, Sun Z, Dong D, et al. Attention-based transformer networks for quantum state tomography. *arXiv:2305.05433*, 2023
- 157 Madsen C N, Valdetaro L, Mølmer K. Quantum estimation of a time-dependent perturbation. *Phys Rev A*, 2021, 104: 052621
- 158 Mahler D H, Rozema L A, Darabi A, et al. Adaptive quantum state tomography improves accuracy quadratically. *Phys Rev Lett*, 2013, 111: 183601
- 159 Martina S, Gherardini S, Caruso F. Machine learning classification of non-Markovian noise disturbing quantum dynamics. *Phys Scr*, 2023, 98: 035104
- 160 Martina S, Hernández-Gómez S, Gherardini S, et al. Deep learning enhanced noise spectroscopy of a spin qubit environment. *Mach Learn Sci Technol*, 2023, 4: 02LT01
- 161 McDonald A, Clerk A A. Exponentially-enhanced quantum sensing with non-Hermitian lattice dynamics. *Nat Commun*, 2020, 11: 5382
- 162 Meiboom S, Gill D. Modified spin-echo method for measuring nuclear relaxation times. *Rev Sci Instrum*, 1958, 29: 688–691
- 163 Merkel S T, Gambetta J M, Smolin J A, et al. Self-consistent quantum process tomography. *Phys Rev A*, 2013, 87: 062119
- 164 Michael Y, Bello L, Rosenbluh M, et al. Squeezing-enhanced Raman spectroscopy. *npj Quantum Inf*, 2019, 5: 81
- 165 Mogilevtsev D, Řeháček J, Hradil Z. Self-calibration for self-consistent tomography. *New J Phys*, 2012, 14: 095001
- 166 Mohseni M, Lidar D A. Direct characterization of quantum dynamics. *Phys Rev Lett*, 2006, 97: 170501
- 167 Mohseni M, Lidar D A. Direct characterization of quantum dynamics: General theory. *Phys Rev A*, 2007, 75: 062331
- 168 Mohseni M, Rezakhanlou A T, Lidar D A. Quantum-process tomography: Resource analysis of different strategies. *Phys Rev A*, 2008, 77: 032322
- 169 Mohseni N, Fösel T, Guo L, et al. Deep learning of quantum many-body dynamics via random driving. *Quantum*, 2022, 6: 714
- 170 Morris P A, Aspden R S, Bell J E C, et al. Imaging with a small number of photons. *Nat Commun*, 2015, 6: 5913
- 171 Muhonen J T, Dehollain J P, Laucht A, et al. Storing quantum information for 30 seconds in a nanoelectronic device. *Nat Nanotech*, 2014, 9: 986–991
- 172 Müller G M, Oestreich M, Römer M, et al. Semiconductor spin noise spectroscopy: Fundamentals, accomplishments, and challenges. *Physica E*, 2010, 43: 569–587
- 173 Nielsen E, Gamble J K, Rudinger K, et al. Gate Set Tomography. *Quantum*, 2021, 5: 557
- 174 Nielsen F. Cramér-Rao lower bound and information geometry. In: *Connected at Infinity II. Texts and Readings in Mathematics*, vol. 67. Gurgaon: Hindustan Book Agency, 2013, 18–37
- 175 Nielsen M A, Chuang I L. *Quantum Computation and Quantum Information*, 10th ed. New York: Cambridge Univ Press, 2010
- 176 Nielsen M A, Dawson C M, Dodd J L, et al. Quantum dynamics as a physical resource. *Phys Rev A*, 2003, 67: 052301
- 177 Norris L M, Lucarelli D, Frey V M, et al. Optimally band-limited spectroscopy of control noise using a qubit sensor. *Phys Rev A*, 2018, 98: 032315
- 178 Norris L M, Paz-Silva G A, Viola L. Qubit noise spectroscopy for non-Gaussian dephasing environments. *Phys Rev Lett*, 2016, 116: 150503
- 179 Nurdin H I, Guță M. Parameter estimation and system identification for continuously-observed quantum systems. *Ann Rev Control*, 2022, 54: 295–304
- 180 Oh C, Lee C, Rockstuhl C, et al. Optimal Gaussian measurements for phase estimation in single-mode Gaussian metrology. *npj Quantum Inf*, 2019, 5: 10
- 181 Ohki K. A smoothing theory for open quantum systems: The least mean square approach. In: *2015 54th IEEE Conference on Decision and Control (CDC)*. New York: Curran Associates, 2015, 4350–4355
- 182 Palmieri A M, Kovlakov E, Bianchi F, et al. Experimental neural network enhanced quantum tomography. *npj Quantum Inf*, 2020, 6: 20
- 183 Pan Y, Xi Z R, Cui W. Optimal dynamical decoupling sequence for the Ohmic spectrum. *Phys Rev A*, 2010, 81: 022309
- 184 Paris M, Řeháček J. *Quantum State Estimation*. New York: Springer, 2004

- 185 Pastori L, Olsacher T, Kokail C, et al. Characterization and verification of trotterized digital quantum simulation via Hamiltonian and Liouvillian learning. *PRX Quantum*, 2022, 3: 030324
- 186 Paz-Silva G A, Lee S W, Green T J, et al. Dynamical decoupling sequences for multi-qubit dephasing suppression and long-time quantum memory. *New J Phys*, 2016, 18: 073020
- 187 Paz-Silva G A, Norris L M, Beaudoin F, et al. Extending comb-based spectral estimation to multi-axis quantum noise. *Phys Rev A*, 2019, 100: 042334
- 188 Paz-Silva G A, Norris L M, Viola L. Multiqubit spectroscopy of Gaussian quantum noise. *Phys Rev A*, 2017, 95: 022121
- 189 Paz-Silva G A, Viola L. General transfer-function approach to noise filtering in open-loop quantum control. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 250501
- 190 Pereira L, Zambrano L, Cortés-Vega J, et al. Adaptive quantum tomography in high dimensions. *Phys Rev A*, 2018, 98: 012339
- 191 Pezzé L, Smerzi A. Entanglement, nonlinear dynamics, and the Heisenberg limit. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 100401
- 192 Pezzé L, Smerzi A, Oberthaler M K, et al. Quantum metrology with nonclassical states of atomic ensembles. *Rev Modern Phys*, 2018, 90: 035005
- 193 Pirandola S, Bardhan B R, Gehring T, et al. Advances in photonic quantum sensing. *Nat Photonics*, 2018, 12: 724–733
- 194 Pogorelov I A, Struchalin G I, Straupe S S, et al. Experimental adaptive process tomography. *Phys Rev A*, 2017, 95: 012302
- 195 Pollock F A, Rodríguez-Rosario C, Frauenheim T, et al. Non-Markovian quantum processes: Complete framework and efficient characterization. *Phys Rev A*, 2018, 97: 012127
- 196 Pooser R C, Lawrie B. Ultrasensitive measurement of microcantilever displacement below the shot-noise limit. *Optica*, 2015, 2: 393–399
- 197 Proctor T, Rudinger K, Young K, et al. Measuring the capabilities of quantum computers. *Nature Phys*, 2022, 18: 75–79
- 198 Proctor T J, Knott P A, Dunningham J A. Multiparameter estimation in networked quantum sensors. *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 080501
- 199 Qi B, Hou Z, Li L, et al. Quantum state tomography via linear regression estimation. *Sci Rep*, 2013, 3: 3496
- 200 Qi B, Hou Z, Wang Y, et al. Adaptive quantum state tomography via linear regression estimation: Theory and two-qubit experiment. *npj Quantum Inf*, 2017, 3: 19
- 201 Rabitz H, de Vivie-Riedle R, Motzkus M, et al. Whither the future of controlling quantum phenomena? *Science*, 2000, 288: 824–828
- 202 Rambach M, Qaryan M, Kewming M, et al. Robust and efficient high-dimensional quantum state tomography. *Phys Rev Lett*, 2021, 126: 100402
- 203 Rao C R. Information and the accuracy attainable in the estimation of statistical parameters. *Bull Calcutta Math Soc*, 1945, 37: 81–89
- 204 Ren Z H, Li Y, Li Y N, et al. Development on quantum metrology with quantum Fisher information (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2019, 68: 040601 [任志红, 李岩, 李艳娜, 等. 基于量子 Fisher 信息的量子计量进展. *物理学报*, 2019, 68: 040601]
- 205 Romach Y, Müller C, Unden T, et al. Spectroscopy of Surface-Induced Noise Using Shallow Spins in Diamond. *Phys Rev Lett*, 2015, 114: 017601
- 206 Rouchon P, Ralph J F. Efficient quantum filtering for quantum feedback control. *Phys Rev A*, 2015, 91: 012118
- 207 Roy S M, Braunstein S L. Exponentially Enhanced Quantum Metrology. *Phys Rev Lett*, 2008, 100: 220501
- 208 Sank D, Barends R, Bialczak R C, et al. Flux noise probed with real time qubit tomography in a Josephson phase qubit. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 067001
- 209 Santagati R, Gentile A A, Knauer S, et al. Magnetic-field learning using a single electronic spin in diamond with one-photon readout at room temperature. *Phys Rev X*, 2019, 9: 021019
- 210 Santiago-Cruz T, Gennaro S D, Mitrofanov O, et al. Resonant metasurfaces for generating complex quantum states. *Science*, 2022, 377: 991–995
- 211 Sastry S. *Nonlinear Systems: Analysis, Stability, and Control*. New York: Springer, 1999
- 212 Schnabel R, Mavalvala N, McClelland D E, et al. Quantum metrology for gravitational wave astronomy. *Nat Commun*, 2010, 1: 121
- 213 Schoelkopf R J, Clerk A A, Girvin S M, et al. Qubits as spectrometers of quantum noise. In: *Quantum Noise in Mesoscopic Physics*. Dordrecht: Springer, 2003, 175–203
- 214 Shu C C, Yuan K J, Dong D, et al. Identifying strong-field effects in indirect photofragmentation reactions. *J Phys*

- Chem Lett, 2017, 8: 1–6
- 215 Sidhu J S, Kok P. Geometric perspective on quantum parameter estimation. *AVS Quantum Sci*, 2020, 2: 014701
- 216 Sinitsyn N A, Pershin Y V. The theory of spin noise spectroscopy: A review. *Rep Progr Phys*, 2016, 79: 106501
- 217 Slichter C P. *Principles of Magnetic Resonance*, 3rd ed. Berlin: Springer-Verlag, 1990
- 218 Smolin J A, Gambetta J M, Smith G. Efficient method for computing the maximum-likelihood quantum state from measurements with additive Gaussian noise. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 070502
- 219 Soare A, Ball H, Hayes D, et al. Experimental noise filtering by quantum control. *Nature Phys*, 2014, 10: 825–829
- 220 Sone A, Cappellaro P. Hamiltonian identifiability assisted by a single-probe measurement. *Phys Rev A*, 2017, 95: 022335
- 221 Song H T, Zhang G F, Xi Z R. Continuous-mode multiphoton filtering. *SIAM J Control Optim*, 2016, 54: 1602–1632
- 222 Staudacher T, Shi F, Pezzagna S, et al. Nuclear magnetic resonance spectroscopy on a (5-nanometer)³ sample volume. *Science*, 2013, 339: 561–563
- 223 Stenberg M P V, Sanders Y R, Wilhelm F K. Efficient estimation of resonant coupling between quantum systems. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 210404
- 224 Surawy-Stepney T, Kahn J, Kueng R, et al. Projected least-squares quantum process tomography. *Quantum*, 2022, 6: 844
- 225 Suter D, Álvarez G A. Colloquium: Protecting quantum information against environmental noise. *Rev Modern Phys*, 2016, 88: 041001
- 226 Szańkowski P, Ramon G, Krzywda J, et al. Environmental noise spectroscopy with qubits subjected to dynamical decoupling. *J Phys Condens Matter*, 2017, 29: 333001
- 227 Szczykulska M, Baumgratz T, Datta A. Multi-parameter quantum metrology. *Adv Phys X*, 2016, 1: 621–639
- 228 Taylor M A, Bowen W P. Quantum metrology and its application in biology. *Phys Rep*, 2016, 615: 1–59
- 229 Teo Y S, Englert B G, Řeháček J, et al. Adaptive schemes for incomplete quantum process tomography. *Phys Rev A*, 2011, 84: 062125
- 230 Torlai G, Mazzola G, Carrasquilla J, et al. Neural-network quantum state tomography. *Nature Phys*, 2018, 14: 447–450
- 231 Tóth G, Apellaniz I. Quantum metrology from a quantum information science perspective. *J Phys A*, 2014, 47: 424006
- 232 Treps N, Grosse N, Bowen W P, et al. A quantum laser pointer. *Science*, 2003, 301: 940–943
- 233 Tsang M. Optimal waveform estimation for classical and quantum systems via time-symmetric smoothing. *Phys Rev A*, 2009, 80: 033840
- 234 Tsang M. Time-symmetric quantum theory of smoothing. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 250403
- 235 Tsang M. A Bayesian quasi-probability approach to inferring the past of quantum observables. *arXiv:1403.3353*, 2014
- 236 Tsang M, Nair R, Lu X-M. Quantum theory of superresolution for two incoherent optical point sources. *Phys Rev X*, 2016, 6: 031033
- 237 Tse M, Yu H, Kijbunchoo N, et al. Quantum-enhanced advanced LIGO detectors in the era of gravitational-wave astronomy. *Phys Rev Lett*, 2019, 123: 231107
- 238 Uhrig G S. Keeping a quantum bit alive by optimized π -pulse sequences. *Phys Rev Lett*, 2007, 98: 100504
- 239 Uhrig G S. Exact results on dynamical decoupling by π pulses in quantum information processes. *New J Phys*, 2008, 10: 083024
- 240 Vandersypen L M K, Chuang I L. NMR techniques for quantum control and computation. *Rev Modern Phys*, 2005, 76: 1037–1069
- 241 Verstraete F, Doherty A C, Mabuchi H. Sensitivity optimization in quantum parameter estimation. *Phys Rev A*, 2001, 64: 032111
- 242 Viola L, Knill E, Lloyd S. Dynamical decoupling of open quantum systems. *Phys Rev Lett*, 1999, 82: 2417–2421
- 243 Viola L, Lloyd S. Dynamical suppression of decoherence in two-state quantum systems. *Phys Rev A*, 1998, 58: 2733–2744
- 244 Vladimirov I G, Petersen I R. Coherent quantum filtering for physically realizable linear quantum plants. In: 2013 European Control Conference (ECC). New York: Curran Associates, 2013, 2717–2723
- 245 Vogel K, Risken H. Determination of quasiprobability distributions in terms of probability distributions for the rotated quadrature phase. *Phys Rev A*, 1989, 40: 2847–2849
- 246 Wang H Y, Zheng W Q, Yu N K, et al. Quantum state and process tomography via adaptive measurements. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2016, 59: 100313
- 247 Wang J, Paesani S, Santagati R, et al. Experimental quantum Hamiltonian learning. *Nature Phys*, 2017, 13: 551–555
- 248 Wang X L, Chen L K, Li W, et al. Experimental ten-photon entanglement. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 210502

- 249 Wang Y, Dong D, Qi B, et al. A Quantum Hamiltonian identification algorithm: Computational complexity and error analysis. *IEEE Trans Automat Control*, 2018, 63: 1388–1403
- 250 Wang Y, Dong D, Sone A, et al. Quantum Hamiltonian identifiability via a similarity transformation approach and beyond. *IEEE Trans Automat Control*, 2020, 65: 4632–4647
- 251 Wang Y, Um M, Zhang J, et al. Single-qubit quantum memory exceeding ten-minute coherence time. *Nat Photonic*, 2017, 11: 646–650
- 252 Wang Y, Yin Q, Dong D, et al. Quantum gate identification: Error analysis, numerical results and optical experiment. *Automatica*, 2019, 101: 269–279
- 253 Wang Y, Yokoyama S, Dong D, et al. Two-stage estimation for quantum detector tomography: Error analysis, numerical and experimental results. *IEEE Trans Inform Theory*, 2021, 67: 2293–2307
- 254 Wang Z W, Zhang Y S, Huang Y F, et al. Experimental realization of direct characterization of quantum dynamics. *Phys Rev A*, 2007, 75: 044304
- 255 White G A L, Hill C D, Pollock F A, et al. Demonstration of non-Markovian process characterisation and control on a quantum processor. *Nat Commun*, 2020, 11: 6301
- 256 White G A L, Pollock F A, Hollenberg L C L, et al. Non-Markovian quantum process tomography. *PRX Quantum*, 2022, 3: 020344
- 257 Wiebe N, Granade C, Ferrie C, et al. Hamiltonian learning and certification using quantum resources. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 190501
- 258 Wise D F, Morton J J L, Dhomkar S. Using deep learning to understand and mitigate the qubit noise environment. *PRX Quantum*, 2021, 2: 010316
- 259 Wiseman H M, Milburn G J. *Quantum Measurement and Control*. Cambridge: Cambridge Univ Press, 2009
- 260 Wolfgramm F, Ceré A, Beduini F A, et al. Squeezed-light optical magnetometry. *Phys Rev Lett*, 2010, 105: 053601
- 261 Wu R B, Li T F, Kofman A G, et al. Spectral analysis and identification of noises in quantum systems. *Phys Rev A*, 2013, 87: 022324
- 262 Xiao S, Wang Y, Dong D, et al. Optimal and two-step adaptive quantum detector tomography. *Automatica*, 2022, 141: 110296
- 263 Xiao S, Wang Y, Zhang J, et al. On the regularization and optimization in quantum detector tomography. *Automatica*, 2023, 155: 111124
- 264 Xiao S, Xue S, Dong D, et al. Identification of time-varying decoherence rates for open quantum systems. *IEEE Trans Quantum Eng*, 2021, 2: 1–12
- 265 Xin T, Lu S, Cao N, et al. Local-measurement-based quantum state tomography via neural networks. *npj Quantum Inf*, 2019, 5: 109
- 266 Xu L, Zhang L J. Progress in weak-value-based quantum metrology and tomography (in Chinese). *Laser Optoelectron Prog*, 2021, 58: 1011004 [胥亮, 张利剑. 基于弱值的量子精密测量与量子层析研究进展. *激光与光电子学进展*, 2021, 58: 1011004]
- 267 Xue S, Hush M R, Petersen I R. Feedback tracking control of non-Markovian quantum systems. *IEEE Trans Contr Syst Technol*, 2017, 25: 1552–1563
- 268 Xue S, Tan L, Jiang M, et al. A least squares identifier for a quantum non-Markovian environment model. *Quantum Inf Process*, 2019, 18: 310
- 269 Xue S, Wu R, Ma S, et al. Gradient algorithm for Hamiltonian identification of open quantum systems. *Phys Rev A*, 2021, 103: 022604
- 270 Xue S, Zhang J, Petersen I R. Identification of non-Markovian environments for spin chains. *IEEE Trans Contr Syst Technol*, 2019, 27: 2574–2580
- 271 Yan F, Bylander J, Gustavsson S, et al. Spectroscopy of low-frequency noise and its temperature dependence in a superconducting qubit. *Phys Rev B*, 2012, 85: 174521
- 272 Yanagisawa M. Quantum smoothing. *arXiv:0711.3885*, 2007
- 273 Yang W, Wang Z Y, Liu R B. Preserving qubit coherence by dynamical decoupling. *Front Phys China*, 2011, 6: 2–14
- 274 Yoneda J, Takeda K, Otsuka T, et al. A quantum-dot spin qubit with coherence limited by charge noise and fidelity higher than 99.9%. *Nat Nanotech*, 2018, 13: 102–106
- 275 Youssry A, Paz-Silva G A, Ferrie C. Characterization and control of open quantum systems beyond quantum noise spectroscopy. *npj Quantum Inf*, 2020, 6: 95
- 276 Yu Q, Dong D, Petersen I R. Hybrid filtering for a class of nonlinear quantum systems subject to classical stochastic disturbances. *IEEE Trans Cybern*, 2021, 52: 1073–1085
- 277 Yu Q, Dong D, Petersen I R, et al. Filtering for a class of quantum systems with classical stochastic disturbances. *IEEE Trans Contr Syst Technol*, 2019, 27: 2774–2780

- 278 Yu X, Zhang C. Quantum parameter estimation of non-Hermitian systems with optimal measurements. *Phys Rev A*, 2023, 108: 022215
- 279 Yuan H, Fung C H F. Optimal feedback scheme and universal time scaling for Hamiltonian parameter estimation. *Phys Rev Lett*, 2015, 115: 110401
- 280 Yuge T, Sasaki S, Hirayama Y. Measurement of the noise spectrum using a multiple-pulse sequence. *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 170504
- 281 Yurke B, McCall S L, Klauder J R. SU(2) and SU(1, 1) interferometers. *Phys Rev A*, 1986, 33: 4033–4054
- 282 Zhang A, Xie J, Xu H, et al. Experimental self-characterization of quantum measurements. *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 040402
- 283 Zhang C, Wang X. Spin-qubit noise spectroscopy from randomized benchmarking by supervised learning. *Phys Rev A*, 2019, 99: 042316
- 284 Zhang G, Dong Z. Linear quantum systems: A tutorial. *Ann Rev Control*, 2022, 54: 274–294
- 285 Zhang G, Grivopoulos S, Petersen I R, et al. The Kalman decomposition for linear quantum systems. *IEEE Trans Automat Control*, 2017, 63: 331–346
- 286 Zhang J, Mølmer K. Prediction and retrodiction with continuously monitored Gaussian states. *Phys Rev A*, 2017, 96: 062131
- 287 Zhang J, Sarovar M. Quantum Hamiltonian identification from measurement time traces. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 080401
- 288 Zhang J, Sarovar M. Identification of open quantum systems from observable time traces. *Phys Rev A*, 2015, 91: 052121
- 289 Zhang J, Wu R B, Li C W, et al. Asymptotically noise decoupling for Markovian open quantum systems. *Phys Rev A*, 2007, 75: 022324
- 290 Zhang L, Coldenstrodt-Ronge H B, Datta A, et al. Mapping coherence in measurement via full quantum tomography of a hybrid optical detector. *Nat Photonics*, 2012, 6: 364–368
- 291 Zhang L, Datta A, Coldenstrodt-Ronge H B, et al. Recursive quantum detector tomography. *New J Phys*, 2012, 14: 115005
- 292 Zhang M, Sweeney W, Hsu C W, et al. Quantum noise theory of exceptional point amplifying sensors. *Phys Rev Lett*, 2019, 123: 180501
- 293 Zhu H. Quantum state estimation and symmetric informationally complete POMs. PhD Thesis. Singapore: National University of Singapore, 2012
- 294 Zhuang Q. Quantum ranging with Gaussian entanglement. *Phys Rev Lett*, 2021, 126: 240501
- 295 Zurek W H. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. *Rev Modern Phys*, 2003, 75: 715–775
- 296 Zwiernik M, Pérez-Delgado C A, Kok P. General optimality of the Heisenberg limit for quantum metrology. *Phys Rev Lett*, 2010, 105: 180402

Quantum system identification and parameter estimation

Yuanlong Wang, Shuixin Xiao, Qi Yu & Daoyi Dong

Abstract The rapid development of quantum information poses demands for robust and high-precision control of quantum systems, while quantum system identification and parameter estimation are fundamentally important for quantum control. In this paper, we provide a survey on the direction of quantum system identification and parameter estimation, with emphasis on the four branches including quantum metrology, quantum tomography, quantum filtering, and quantum noise spectroscopy. The problem formulation, analysis tools, solutions, and various applications are introduced.

Keywords quantum systems, quantum metrology, quantum tomography, quantum filtering, quantum noise spectroscopy

MSC(2020) 81-02, 81-08, 81P18, 81Q93, 81S22, 81S25, 93B30, 93E11

doi: 10.1360/SSM-2023-0332