序

20 世纪 80 年代初,当我和我的同事有关量子力学控制理论的第一篇研究论文刚刚面世的时候,学术界反应寥寥。仅仅过了几年,量子控制在实验和理论上已经取得了激动人心的进展,通过系统地引入最优控制理论,科学家能够设计超短激光脉冲来更有效地控制分子化学键。之后,随着量子计算理论的兴起,量子控制得到了空前的关注,有关研究日益丰富起来。时至今日,量子控制作为交叉学科已经渗入到如纳米材料、玻色-爱因斯坦凝聚态物理等更多的前沿学科分支中。

量子控制理论的物理基础是上世纪初发展起来的量子力学理论。基于薛定谔方程、海森伯方程、刘维尔方程以及在此基础上发展起来的描述各种环境下的量子力学系统的数学模型,可以展开有关系统可控性、可逆性等各种基本结构性质的研究,它们在量子计算以及分子系统的相干控制中已经得到广泛应用;最近,关于散射量子系统的研究也开始取得重要进展。

量子控制系统有别于经典控制系统的最大特征在于其反馈控制的特殊性,因为反馈所需的量子测量即使在理论物理和实验物理领域至今也没有得到完全解决。对量子系统的反馈控制的研究虽然还很不充分,但是已经引起了来自各个领域的众多学者的关注,也成为量子系统控制理论最吸引人的魅力所在之一。在量子系统的控制设计中,最优控制最先取得成功,而且至今仍是主要的研究方向,并且通过引入学习控制等技术使得最优控制不仅在理论上,而且在实验上取得了突破。理论和实验相互促进,产生出更多新的成果和新的问题,为最终量子控制走向实用的技术打下坚实的基础。

丛爽教授是国内最早从事量子力学控制研究的学者之一。她以及她在中国科学技术大学的合作者通过多年的努力,已经具备了深厚的基础,并且在国内率先做出了多项研究成果。在此基础上,丛爽教授积多年研究心得编写了国内第一本有关量子力学系统控制研究的专著。本书内容基本涵盖了当前量子控制的主要研究方向,为正在从事以及将来可能从事这方面研究的老师和学生提供了良好的研究参考。希望这本书能够吸引来自各个领域的更多的研究人员,带动国内相关研究的蓬勃发展。

维纳在他著名的《控制论》中指出:控制论是包含控制、通信与统计力学的综合学科。回顾量子控制的发展,我们可以将它看作是包含控制理论、量子通信和量子统计力学的综合学科,其中每个因素都对其之前的经典理论产生了概念性的革新。几乎所有经典控制中的问题都可以在这里找到量子对应,但是具有独特量子特性

的新问题则引起学者们的更多兴趣,它们是潜在的量子技术革命的基础。我期待在21世纪,量子控制的理论和技术得到突飞猛进的发展,国内能有更多的学者和学生能够进入这个领域并做出自己的贡献。

谈自忠
于圣路易斯华盛顿大学
2005年4月26日

前　　言

量子力学系统控制的动因起源于量子计算机的设想。仿照经典的计算机(冯·诺依曼计算机),最简单的量子系统就是一个量子位(即量子比特)的两个态(0 或 1)的控制及其物理实现,所以量子系统控制早在 20 世纪 70 年代就有物理学者在做大量的理论以及物理操作实现的有关量子逻辑门操作的研究,直至今日,已在实验室中可以进行 7 位的量子比特的操作。所以可以说直到 1998 年前后,在进行量子系统控制的研究中,物理和化学专业的研究人员占绝大多数,在那些领域,他们对量子状态的变换一般使用“操纵”而不用“控制”这个词。1998 年以后,从事计算机、系统工程、数学等一系列交叉学科的学者开始介入量子系统控制的研究中,开始从系统的角度去审视量子系统(哪怕只是一个量子位的量子系统)的控制问题。以前人们的研究主要是对个案的研究,即对某个专门挑选的微观粒子的某一点进行研究。当关注一般量子系统控制问题时,人们选择了一个典型的自旋 1/2 粒子量子系统作为被控对象,集中注意力来对其进行不同情况下的系统建模、可控性分析以及最优控制等方面的研究。

为什么挑选自旋 1/2 粒子作为被控系统?如何选择被控对象是一件非常重要的事情。由于自旋 1/2 粒子系统的数学模型是双线性的系统模型,它与宏观系统中的双线性系统在数学模型结构上具有完全一样的形式。另外,自旋 1/2 粒子系统在 x、y 和 z 轴上的自旋与宏观世界中的刚体绕 x、y 和 z 轴的旋转是一致的,并且存在的相互之间的关系式满足李群中组成李代数的条件。正是由于自旋 1/2 粒子系统的数学模型与宏观世界中人们已研究过的一些系统有相同的模型形式,所以从数学的角度上来说,它们应当具有相同的特性,完全可以借用宏观世界的研究方式和结果来针对具体情况加以分析和应用。这些正是可以对量子系统进行研究的方法和可能性。

有关量子力学系统控制中的研究问题主要集中在以下几个方面。

一、量子位的制备与操控

从理论上研究一个系统,就是从它的数学模型入手,通过理论分析和推导来达到某个期望的结果。对量子系统控制的研究也不例外。量子系统的普适关系式就是薛定谔方程,即波函数 ψ 与哈密顿量 H 之间的微分关系式:$\mathrm{i}\hbar\dot{\psi} = H\psi$。这是一个齐次方程。对此方程,当已知波函数的初始值 $\psi(0)$,则方程的通解为:$\psi(t) =$

$U(t)\psi(0)$，其中，$U(t)$在系统控制中称为转移矩阵，在量子力学中称为状态演化矩阵，所以从控制理论角度上说，只要求出状态演化矩阵 $U(t)$，就可以获得任何时刻 t 的波函数 $\psi(t)$。

那么，$U(t)$该怎么求？由波函数 ψ 与哈密顿量 H 所表示出的薛定谔方程可知，如果 H 与时间无关，则有：$U(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}$。由此可见，只要 H 已知，则可求出 $U(t)$。现在的问题是，数学公式容易写，但在具体的物理实验中如何去实现数学表达式成为关键，因为要想实现量子计算机以及要验证所做的理论研究的正确性，全都要依赖于物理实验的结果。更何况量子力学中的绝大多数的理论都是假设，也都是通过做出的实验验证了其中的正确性。所以任何有关量子控制系统理论的正确性，都应当建立在能够通过设计实验来实现的基础之上。这也正是我们每个系统控制研究人员必须努力的地方。

由一个复杂的高维的 H 所获得的 $U(t)$是无法直接在实验室里进行操纵和实现的，所以在实验物理领域里很早就开始了有关一比特及两比特的简单量子逻辑门操纵的研究，并已证明任何逻辑门都可以用两比特逻辑门来实现。这告诉我们可以通过把复杂的高维的 $U(t)$分解为由一比特或两比特通用逻辑门的组合来实现高维转移矩阵的物理实现问题。所以对转移矩阵 $U(t)$的分解成为目前量子系统控制中的一个重要研究方向，采用最多的是 Cartan 分解、Schmidt 分解、Wei-Norman 分解，涉及的主要是数学问题。对转移矩阵 $U(t)$分解的控制问题的描述为：当给定初始态 $\psi(0)$及终态 $\psi(t_f)$值时，求可实现的状态演化矩阵 $U(t)$。因为由 $\psi(t_f)=U(t)\psi(0)$，则立刻可以得到 $U(t)=\psi(t_f)\psi^{-1}(0)$。但如果希望能够在实验室里实现，则还需要对所获得的 $U(t)$的表达式做进一步的分解工作。解决的方式就是将 $U(t)$分解为低维(通常是直到 2 维)的可实现的量子逻辑门。如何分解以及怎样分解则涉及被控系统的具体参数。对于自旋 1/2 粒量子系统，可将哈密顿量 H 分成两部分：系统内部哈密顿量 H_0 以及外部控制哈密顿量 H_1。通过一定的整理，系统的薛定谔方程可以写成如下的形式：$\dot{X}=\left(A+\sum Bu\right)X=Ax+\sum BXu$。这是一个双线性系统，与经典双线性系统不同之处仅在于该系统中的 A 和 B 是由系统自旋算符组成，而自旋算符在一定的条件下等价于著名的泡利(Pauli)矩阵，泡利矩阵之间满足一定的对易关系，这个对易关系式正好组成李群中李代数的元素，所以对 $U(t)$的分解在一定程度上就转化为对李群的分解。根据泡利矩阵的对易关系式，以及 x、y、z 轴的旋转方式，可以将原薛定谔方程式写成 2 维、3 维或 4 维矩阵方程形式。所以由此可以进行对特殊李群 $SU(2)$、$SU(3)$、$SU(4)$等的分解工作。另外，再加上可以选择是对系统的一个量子位的两个状态(即 0 或 1 态)的控制、还是对系统的一个量子位的 n 个态控制、n 个量子位 n 态控制等而出现大量的有关这方面的状态演化矩阵构造及其分解的研究。

有关这方面的内容,将在第 9 章中作详细的介绍。

二、量子系统的可控性

量子系统控制的理论问题中研究最早并吸引众多数学家研究的、最引人瞩目的是量子系统的可控性问题。的确,许多量子系统的可控性问题已经被解决,如连续光谱量子系统的可控性,双线性量子系统波函数的可控性,分子系统的可控性,分布式系统的可控性,旋转系统的可控性,NMR 分光器量子演化的可控性,紧致李群量子系统的可控性问题等。在解决这些问题中,引入了许多量子可控性的新观点和新概念。

通过对量子系统可控性的对比分析,我们发现量子系统的许多可控性的判定定理是相似的,不同的只是在定义时所考虑的量子系统的物理特性不同。量子系统的可控性通过右不变系统的可控性分析最直观,而且右不变系统可控性与双线性系统的可控性的联系与量子系统的一些可控性定理的联系是一致的。利用李群、李代数的知识,并结合特殊情况下量子系统特有的物理特性,又可获得量子系统的其他一些可控性的判定定理,但这些定理都是在以上所分析由李代数判定可控性的基础上推导出的。

量子系统的可控性完全是在对系统参数 A 和 B 进行李群或李代数的构造基础上进行的。同样也可分为在 $SU(2)$、$SU(3)$、$SU(4)$或更高维上的可控性矩阵的构造,不过目前人们主要还是针对有限维系统可控性进行研究的,少数对无限维系统的研究也只是概念性的。本书将在第 8 章对双线性系统可控性进行介绍,然后在第 10 章里着重讨论量子系统的可控性及其与双线性系统可控性之间的关系。

三、量子系统最优控制

量子系统的重要应用之一是量子计算,它是基于量子态的转换,因为任何有效的 k 位量子门可以用特殊幺正李群 $SU(2k)$上的一个矩阵来实现,所以有效的量子门的实施是任何量子计算应用的必要条件。幺正算符的时间演化由 $SU(2k)$上右张积矢量来确定。这样量子门的产生就变成了一个通过控制理论所获得的可控性、进而根据期望的某一性能指标来执行幺阵变换的控制能量或时间的最优化问题。利用几何控制理论推导出最优控制输入,引导量子系统的幺正算符到目标的演化是目前量子系统最优控制的主要研究内容。具体为在限制控制量最小(但控制形式无限制,或只要求有界),以及时间最优(短)的条件下的量子态转换的控制策略地设计。有关这方面的内容将在第 14 章详细讨论。

四、反馈控制及测量的研究

与经典控制一样,量子系统控制也分为开环和闭环控制。通过激光产生电磁场来时变地控制化学反应是一个众所周知的开环量子控制问题。在利用频率来进行控制的方法中,开发出不同的量子的路径干涉控制方法;在对时间进行的控制中,采用超速光脉冲产生的波包动力学来进行控制。对于化学过程的某些特殊控制,可以通过最优化光脉冲的温度和光谱结构来实现控制。

由于反馈控制涉及到状态变量的测量,而对量子态的测量必然导致塌缩,所以目前所能够在实验室里实现的绝大多数的量子系统的控制都是开环控制。而真正具有无破坏测量的状态估计与反馈控制,研究的较少也较浅。目前人们主要试图通过定义状态之间的距离,构造一个适当的状态反馈,以保证闭环控制系统的渐近稳定性,通过使实际和最终状态之间的距离减少的途径来达到反馈控制的目的。

实际上量子理论本身并没有解决测量问题,因为量子理论没有描述理论与经验的连接纽带——测量过程。在目前的量子理论中,测量过程被简单地当作是一种瞬时的、非连续的波函数的投影过程,然而对于这一过程为何发生及如何发生却说不清楚,因此,目前的量子理论对实在过程的描述是不完备的。本书在不同的章节里对反馈控制及测量问题都进行了深度不同的探讨和研究。

五、混合态及纠缠态的控制

目前几乎所有的有关量子系统状态的控制(即对由波函数所表示的态矢的控制)都是对本征态的控制。虽然也有一些文章是对密度矩阵进行分析与设计的,但也没有强调是对混合态的研究。真正对混合态及纠缠态进行控制的研究还是相当少的,也不深入,而在物理实验室中却已经完成了混合态的制备工作。所以在这点上,实验是超前控制理论的。本书将在第 13 章里采用几何代数的方法对量子系统的状态进行分析。

六、量子系统仿真实验

有关量子系统仿真的工作,物理化学等方面的学者在进行理论和实验研究的同时,就一直在做这方面的工作。所以要想对量子系统进行合理可实现的控制,必须首先对量子系统所具有的特性掌握清楚,才能够根据这些特性去设计出状态演化矩阵 $U(t)$,然后将其分解为矩阵指数的乘积,构造出具有阵迹为零的斜厄米矩阵的系统参数,以便组成一个李代数的集合,并由此判断系统的可控性,再通过选

择合适的控制策略对状态演化矩阵 $U(t)$进行适当的分解达到可实现的量子逻辑门操纵的目的。

本书在相关的章节里,通过对量子系统进行仿真实验来阐明所提出方法的正确性;通过对比来揭示量子力学系统中不同参数之间的关系;从控制的角度对量子力学系统进行理论分析、系统建模、综合、控制器的设计和仿真实验的验证及其性能的对比研究。力求对量子力学系统的控制给出一个较全面的导论,引导有志从事量子控制之士,从本书进入量子力学系统控制的领域,开始进行 21 世纪的伟大研究。

要想进行量子系统控制的研究,需要涉及三个方面知识的灵活运用:1)量子力学系统理论;2)李群、李代数及其在量子力学系统中的应用;3)几何控制理论。当然还少不了经典控制理论及其应用的基础。有关量子系统控制的理论与实现的研究任重道远,需要我们大家的共同努力。

量子力学系统控制是一个交叉学科的研究方向,其中充满着极具挑战性的研究课题。本书在写作上定位为教材,考虑到不同读者在背景知识上的差异,尽可能以浅显和自成体系的方式叙述主要理论思路,力图深入浅出;在细节的处理上尽力兼顾严谨性、启发性和易读性,可供自动控制、计算机、系统工程以及物理专业的高年级本科生和研究生使用。本书要求读者具有大学物理和高等数学的基础,但不要求具有相对论、量子力学、量子电动力学以及计算机方面的专门知识。在需要用到这些专门知识的地方,本书力图做到必要的过渡。如果阅读中发现有不太清楚的地方,不妨跳过。有些地方我们不得不用到少量后面的内容才会完整解释的技术术语,这些术语可以暂时简单地接受下来,等深入理解了全部术语后,读者可再返回来阅读。

本书具有多种用途:可作为相关课程的基础教材,从用于教授量子系统控制的短期专题讲座到涉及整个领域的一学期的正式课程。只想对量子系统控制稍做了解的读者可以自学;想进入研究前沿的读者也可以选用本书。本书的目的之一还在于作为该领域的一本参考书,特别希望它对初次接触这个领域的研究人员有价值。

在量子力学理论及其应用迅猛发展的今天,有关量子力学系统的控制还是刚刚起步,国内外有关量子力学系统控制的书籍、教材和参考书都非常少。作者在广泛阅读和研究量子力学系统各方面的理论与实验、加上中国科学技术大学自动化系量子系统控制研究小组人员几年来的勤奋努力,在国内率先做出的多项研究成果的基础上写出的国内第一本有关量子力学系统控制研究的专著。本书共分为 18 章,分别为:概论,量子力学系统理论基础,量子态的操控,量子力学系统模型的建立,限制温度下的量子动力学,薛定谔方程的解,李群和李代数及其应用,双线性系统及其控制,幺正演化算符的分解及其实施,量子系统的可控性与可达性,量子

系统反馈控制,混合态和纠缠态及其分析,量子系统的几何代数分析,量子系统的最优控制,量子测量,量子系统的反馈相干控制,量子系统的应用。希望通过本书,能够带动国内有关量子力学系统控制研究进一步深入的展开。在此,要特别感谢曾在研究小组做过研究并为本书做出贡献的郑毅松、郑捷、郑祺星和钱辉环;还要感谢研究小组的研究生东宁、匡森、戴谊和姬北辰。没有他们的努力,这本书是不可能这么快就面世的。

本书的出版得到了中国科学技术大学研究生院的资助,在此表示衷心的感谢。

由于作者水平有限,书中不当之处在所难免,敬请读者批评指教。

丛 爽
于中国科学技术大学
2005 年 4 月 26 日

目　　录

第 1 章　概　　论

1.1　从经典力学系统到量子力学系统

20 世纪以前的物理学认为自然界存在着两种不同的物质:一种是可以定义于空间一个小区域中的实物粒子,其运动状态可以由动力学变量坐标和动量的不同取值来描述,其运动规律遵从牛顿力学定律。宏观物体是大量微观粒子的聚集态。对宏观物体运动状态的描述原则上可以单个粒子的描述为基础,应用统计的方法解决;另一类物质是弥散于整个空间中的辐射场,其运动遵从麦克斯韦(Maxwell)方程组。带电粒子在电磁场中的运动则可联立洛伦兹(Lorentz)力公式和麦克斯韦方程组解决。不论是牛顿方程还是麦克斯韦方程组都是拉普拉斯(Laplace)决定论的,即给出系统初始状态,通过解运动方程,就可唯一地决定系统未来任何时刻的运动状态。

具体地说,就是在经典力学中,一个粒子的运动状态可以用它在每一时刻 t 的坐标和动量(即相空间中的一点)给出确切地描述,运动状态随时间的演化遵守牛顿方程(或与之等价的正则方程等),所以,当粒子在初始 $t=0$ 时刻的坐标和动量一旦给定,则以后任何 $t>0$ 时刻粒子的运动状态就随之而确定。控制理论与控制工程依赖的主要是被控系统的数学模型,而系统模型的建立依赖于物理定律。牛顿力学三定律是经典力学的基本定律,这个定律再加上能量守恒定律就可以推演出经典力学的主要框架。这是一个确定性的描述。那么,微观粒子的运动状态又是怎样的呢?

1900 年 12 月 14 日,普朗克(Planck)在柏林物理学会上提出了关于能量量子化的假说。这一天被公认为是“量子诞生日”。

普朗克的假说是对谐振子做出的,主要内容为:

1) 为了得到与实验一致的平均能量,谐振子吸收或辐射的能量只可能是间断的、不连续的,它们为某一能量元 ε_0 的整数倍,即

$$E_n = n\varepsilon_0, \qquad n = 0,1,2,\cdots \tag{1.1}$$

2) 能量元 ε_0 必须与频率成正比,即

$$\varepsilon_0 = h\nu \tag{1.2}$$

其中,ν 为振子频率,h 为普朗克常数,它的值由实验测定。

普朗克关于能量量子化的假说具有划时代的意义。它以普朗克常数 h 为标志,用能量元(子)的概念具体地显示了一些自然过程的不连续性,是对经典物理关

于一切自然过程连续性的根本否定。

1905 年爱因斯坦(A. Einstein)提出了光量子的假说(陈咸亨译 1979):从点光源发出的光是由个数有限并局限在空间各点的能量子组成,这些能量子能够运动,但是不能再分割,只能整个的被吸收或产生出来。经过推导,爱因斯坦独立地得到了光量子的能量方程:$E = h\nu$。后来证明了其正确性,且 h 就是普朗克常数。1916 年,爱因斯坦提出了光不仅具有能量而且也具有动量的论断。通过推导,他建立了动量 p 与波长 λ 之间的关系为:$p = h/\lambda$。这样人们就可以得到描述光子性质的两个方程

$$E = h\nu \tag{1.3}$$

$$p = h/\lambda \tag{1.4}$$

这两个方程通过普朗克常数 h 把表征光子波动性的频率 ν 和波长 λ 与表征粒子特征的能量 E 和动量 p 有机地联系在一起,使光的波动性和粒子性得到了统一。

我们注意到普朗克常数 h 具有动量-长度的量纲;同时等价地具有能量-时间的量纲,它的数值为 $h = 6.626 \times 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$,其中 $1\mathrm{J} = 10^7\mathrm{erg}$。在大多数量子力学的应用中已经证明,使用量值 $h/2\pi$ 更方便,它可以被简写成 $\hbar = h/2\pi$,$\hbar$ 的数值为 $\hbar = h/2\pi = 1.055 \times 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$。

1924 年,德布罗意(L. de Broglie)将光的波粒二象性的概念推广到其他客体。他提出,不仅电磁场、光波具有粒子性,而且任何其他的实物粒子,比如电子、质子等,也具有波动性。电子的双缝衍射实验也应具有和光子的双缝衍射实验相同的结果。

对于一个自由粒子,其能量 ε 和动量 p 满足与光子相同的关系式,即

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega, (\hbar = h/2\pi, \omega = 2\pi\nu) \tag{1.5}$$

$$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \tag{1.6}$$

(1.5)式和(1.6)式被称为德布罗意关系式,其中 $\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\boldsymbol{n}$,称为波矢量,或约化波数;$\boldsymbol{n}$ 为波传播方向的单位矢量;λ 为德布罗意波长。在这里,ε 和 p 是表征粒子特性的物理量,而频率 ν、波矢 $\boldsymbol{k}$ 是表征波动特性的物理量,它们通过普朗克常数实现了相互转换,表现出波粒二象性。

考察下述一些典型例子中的德布罗意波长的大小是很有意义的(张启仁,2002)。

1) 能量为 E(eV)的电子的德布罗意波长为(能量 $\varepsilon = p^2/2m$)

$$\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} \approx 10^{-8}E^{-1/2}\mathrm{cm}, (\lambda\!\!\!^{-}\ 称为约化波长)$$

2) 能量为 E(eV)的质子的 $\lambda\!\!\!^{-}$ 为:$\lambda\!\!\!^{-} \approx 5 \times 10^{-10}E^{-1/2}\mathrm{cm}$。

3）以 1cm/s 运动着的 1g 质量的 $\lambdabar$ 为：$\lambdabar \approx 10^{-27}$cm。

由这些数值可知，为什么量子效应只是在原子的范围内才明显地表现出来。就宏观范围来说，所有的尺寸都比德布罗意波长要大得多，以致于波的特性是不可能探测到的。在原子和亚原子的范围内，这些尺寸则与德布罗意波长可相比拟，因而波的特性占据着支配地位。

自由粒子不受外部磁场作用，其能量 E 和动量 p 是一个不随时间和空间变化的常数。由德布罗意关系可知，频率 ν 和波长 λ 也必定是常数，因而与自由粒子相联系的波便是一个平面波。在经典物理学中，对于一个沿 x 轴方向传播的平面波在最简单的情况下，可以用一个余弦函数（或正弦函数）来表示。当初始相位为零时，此函数有如下的形式：

$$\psi = A\cos\left[2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)\right] \tag{1.7}$$

如果平面波是沿任意方向（单位矢量为 $\boldsymbol{n}$）传播的波，则此函数的形式为

$$\psi = A\cos\left[2\pi\left(\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n}}{\lambda} - \nu t\right)\right] = A\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) \tag{1.8}$$

其中 $\boldsymbol{r}$ 是径向坐标。通过欧拉公式

$$e^{i\alpha} = \cos\alpha + i\sin\alpha \tag{1.9}$$

可以把平面波的三角函数形式改写为下列复指数函数的形式

$$\psi = Ae^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)} \tag{1.10}$$

其中，A 为一个常数。

利用德布罗意关系式，可以把（1.10）式改写为

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)} \tag{1.11}$$

对于一维情况，有

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p\cdot x - Et)} \tag{1.12}$$

由此可得，微观自由粒子的德布罗意波是一个在数学上用复指数函数描述的波，它的波长与空间坐标无关，而仅决定于粒子的动量，它的相位则由动量和能量共同确定。所以德布罗意波与经典波在本质上是完全不相同的波。

我们来讨论单个粒子在外力作用下的一维运动。这个外力是任意的，但却是规定的。作为讨论的第一步，我们提出这样的问题：怎样描述这样一个粒子在某个时刻的运动状态呢？在经典力学中，通常是通过粒子在所研究时刻的特定位置和动量的办法来描述的。牛顿定律就正好提供了一种确定运动的方法。但是我们已强调指出，这样的描述在量子力学中是办不到的，因为粒子的轨迹不能很精确地被加以确定。不过，我们一定要从某处开始进行讨论，因而就需要提出最低限度的假设，这个假设就是：粒子在时刻 t 的状态能够尽可能完全的用一个函数 ψ 来描述。

我们就把 ψ 叫做粒子体系的态函数(又称波函数)。

然后我们必须回答以下几个问题:

1) 怎样确定 ψ,即 ψ 依赖于哪些变量?

2) 如何解释 ψ,即怎样由 ψ 来推断出体系的可观测值的性质?

3) ψ 怎样随时间而演变? 体系的运动方程式是什么样的?

回答第一个问题时,我们提出尽可能简单的假设:在时刻 t 做一维运动的无结构(指不具有如自旋等内部自由度的质子)粒子的态函数可以只用空间坐标来表述,即 $\psi=\psi(x,t)$。已经证明,一个无结构粒子可用 ψ 来表示。这个假设是正确的。这意味着任何一个物理状态都可以用一个适当的 ψ 来描述。而且只有单值、有界的态函数 ψ 才与某个物理状态相对应。

玻恩(M. Born)认为,波函数所刻画的是粒子在某一时刻在空间中某一点的概率分布,表示波函数在某一时刻在空间中某一点的强度,即:波函数振幅绝对值的平方与在这一点中找到粒子的概率成正比。和粒子相联系的波是概率波。

一般认为,波函数 $\psi(r,t)$描述了微观粒子的运动状态,即量子态。但在量子力学中,对量子态的描述和经典力学中对状态的描述有着根本的不同。在经典力学中,描述状态依靠给定的一些力学量,如动量、坐标等,在热力学中描述体系的宏观状态依靠给出一些宏观的量,如压强、温度、体积以及状态方程。但在量子力学中,描述粒子的量子态依靠给定的波函数 ψ,但 ψ 本身并不是力学变量,也不具有任何经典物理学中的物理量意义。由 ψ 给定的只是在它所描述的量子态中,测量某力学量的平均值或这个力学量的各种可能值和出现这些可能值的相应概率。

由于微观粒子的运动服从统计规律,因此微观粒子体系的力学性质将由一组力学量及它们的分布概率来表征。所谓微观粒子的态矢量(简称态矢)就是指这些力学量的可能及其分布概率所确定的物理状态。依据波函数的统计,粒子在空间 r 处的概率可由$|\psi(r,t)|^2$求出。同样各力学量的分布概率和它们的平均值也都可由 $\psi(r,t)$得到。从这个意义上看,波函数完全描述了微观粒子的运动状态,即不同的 $\psi(r,t)$给出了各力学量的不同统计分布,这也就相当于表达了不同的运动状态;$\psi(r,t)$随时间的变化,表达了态的变化,即描述了微观粒子的运动过程,所以,波函数 $\psi(r,t)$是描述微观粒子运动状态的函数,被称之为态函数。

微观粒子状态概率性的描述,与经典粒子确定性的描述显然完全不同,其根本原因是微观粒子具有波粒二象性,而经典粒子中对波动性的影响则完全可以忽略不计。

光的波粒二象性表现为,光在某一时刻的行为可以用一个波函数 $\psi(r,t)$描述,$\psi(r,t)$给出光子在 t 时刻在 r 处出现的概率幅值。

1925 年薛定谔(Schrödinger)提出了用微分方程式来描述波函数。通过求解薛定谔方程,能够求出波函数来解决量子力学中的特殊问题。不过,通常不可能获

得该方程的精确解。一般需要使用某些假定来对某一具体问题进行近似求解。例如，当对一个粒子的作用力为零时，其势能为零。此时该粒子的薛定谔方程能被精确的解出。这个“自由”粒子的解被称为一个波包（最初看上去像一个高斯钟形曲线）。所以可以利用波包作为被研究粒子的初始状态，然后，当粒子遇到一个外力作用时，它的势能不再为零，施加的力使波包改变。如何找到一种准确、快速地传播波包的方式，使它仍然能够代表下一刻的粒子，就是一个量子系统控制的课题。

波动性和粒子性在经典物理中是互相排斥、对立和不相容的。如何理解在量子理论中它们可以被统一地用来描述微观粒子？比如电子是分布在 2.82×10^{-15} m 的范围内、质量约为 10^{-31}kg 的粒子，它的空间限度及其质量是如此之小，唯一认识它们的途径是用宏观仪器对它们进行观测。测量它们就意味着对它们发生某种作用，因而对它们产生某种干扰，必然使得粒子在某些条件下表现出的性质像宏观粒子，而在另一些条件下又表现出类似经典波的性质。这些由于量子系统本身所具有的与经典系统完全不同的特殊性质，为量子系统的状态观测及其控制带来了与经典系统完全不同的研究课题。

量子力学理论是 20 世纪科学史上重大发现之一。量子力学理论揭示了经典物理对物质世界的描述仅是在宏观条件下才是正确的。微观世界遵循的是量子规律，世界本质上是量子的，经典规律只是量子规律在宏观条件下的近似。微观粒子具有波粒二象性，它的运动状态、性质、描述方法及其运动规律和经典物理根本不同。对结果的预测不再是拉普拉斯决定论的，而是概率的、统计的。量子力学是我们描述微观粒子运动的一个理论框架和数学结构。量子力学的发现改变了我们对微观世界的描述方法，加深了我们对物质世界本质的理解。

1.2　量子系统控制的提出及发展

本节将详细论述量子系统控制理论从提出到现在二十余年的发展过程。将首先介绍量子系统可控性的研究及其进展，并简要分析简单量子系统的开环控制方法，然后把重点放在学习控制和反馈控制等几种典型闭环控制方法研究的介绍上，分析它们各自的优缺点，并根据量子系统控制的发展趋势，对其应用和发展前景进行预测，从整体上系统地描述建立一套完整的量子控制系统所需要的五个基本步骤，并在此基础上提出建立量子系统控制理论所要解决的几个关键性问题（丛爽等　2003a）。

量子力学理论揭示了物质内部原子及其组成粒子的结构和性质，使人们对物质的认识深入到了原子领域。微观量子世界对人们来说是一个崭新的领域，其中很多奇特的现象都同常理相违背，并很难用经典物理的理论进行解释。通过量子力学，人们成功的解决了氢原子光谱等一系列重大问题，并且随着研究的深入，人

们逐步认识到，量子论不仅可以解释微观领域的一系列奇特现象，同时通过变换，还可以利用它完美地解释宏观物体的运动规律，并利用薛定谔方程证明例如牛顿定律等许多经典物理中的基本定律。因此可以说量子力学的规律不仅支配着微观世界，而且也支配着宏观世界。长期以来一直被人们用来描述宏观物质运动规律的经典物理从本质上来说也只不过是量子力学规律的一种近似而已，对量子力学的研究已经逐渐成为世界各国基础研究的重点之一。另一方面，随着科学技术的进步，量子力学的应用也已深入到科学技术的各个领域，在化学中，人们通过对原子态的控制可以改变反应物质，并使反应按人们预期的方向发生；在物理中，人们利用量子理论来对物质的电磁性质进行更深入的了解；更重要的是，近几年来随着信息技术的发展，人们又相继提出了量子计算机、量子信息网络等一系列设想，希望利用量子一些特有的性质来突破宏观经典物理对物质属性的限制，使人们的生产和生活方式焕然一新。但随着在不同领域对量子进行的深入研究，如何对量子及其状态进行操纵（控制）成了摆在人们面前的一个难题。世界各国都在企图把量子和控制领域联系起来，希望利用宏观控制领域中的概念和方法，结合微观量子世界的特性来对量子及量子态进行控制和研究。

1.2.1　量子系统控制的提出及其理论的研究

什么是量子力学？量子力学是一个数学框架或一套构造物理学理论的规则，例如量子电动力学就是一套以惊人的精确度刻画原子和光的相互作用的物理理论。量子电动力学是在量子力学框架下建立的，不过它还包含量子力学未规定的一些特殊规则。有关量子力学系统的控制可以追溯到 20 世纪 70 年代对单量子系统的完全可控性的研究。在那之前，量子力学应用的典型做法是对包含有大量量子力学系统的批量样本的总体控制，但无法单独访问单个量子系统。例如人们对超导现象有很好的解释，但由于超导体涉及导电金属的巨大样本（相对原子尺度而言），所以只能探测到其量子性质的几个方面，而不能访问构成超导体的单个量子系统。

最早从理论上提出量子系统控制的是美国华盛顿大学的 Huang 和 Tarn (Huang G M and Tarn T J 1983）于 1983 年 6 月在《数学物理杂志》上发表的名为“量子力学系统的可控性”的论文。该文从最基本的系统控制概念出发，在理论上对线性量子系统的可控性进行了详细的讨论，具体分析并给出了有限维空间下量子系统可控的条件，同时利用李代数（Lie algebra）对无限维空间下量子系统的可控性进行了一些数学上的分析，并在最后从大的方向上对量子系统的控制进行了一些展望，提出了几个关键性问题。次年，Ong 等（Ong C K et al. 1984）发表了研究量子力学控制系统可逆性的论文，从理论上给出了不同量子系统的可逆性条件，着重分析了在弱时变场下量子系统的可逆性，在假设系统无破坏可观的基础上建立

了量子的无限维双线性模型。1985年,克拉克(Clark)等(Clark J.K et al. 1985)人发表了分析量子系统的可观性的文章,第一次提出并分析了量子的无破坏测量问题(QNDO)。

这三篇文章分别从可控、可逆、可观的角度对量子系统进行了理论上的建模与分析,为其以后的发展奠定了坚实的理论基础,因此,可以被看成是量子系统控制的一个里程碑。

自此之后,世界各国对量子系统控制的研究纷纷开展起来,并在开环控制领域取得了一些成果,1988年Peirce和Dahleh(Peirce A P et al. 1988)提出了几种近似算法,把量子的无限维控制问题转换为有限维开环控制问题。1993年Warren等(Warren W S et al. 1993b)对量子力学系统控制理论进行了阶段性总结,并结合当时的设备条件,提出了利用激光对量子系统进行开环控制的一些具体方法。随后基于在无破坏测量理论上的突破,反馈控制成为研究的重点,美国麻省理工学院的Lloyd(Llogd S,1997)在1997年发表的文章中提出了一种半经典反馈控制器来对量子系统进行控制,给出了半经典量子系统可观性及可控性的条件,指明这种半经典控制器完全可以用来对哈密顿量子系统进行控制。他在文章的最后指出,尽管还存在一些问题,这种量子控制器可能会对量子计算机和量子信息系统的发展起很大的推动作用。随着经典控制方法同量子理论的紧密结合,人们更多的从理论上分析了利用各种经典控制方法对量子系统进行控制的可行性。Altafini(2002)分析了利用根空间分解法对量子系统进行控制的可行性,并在数学上给出了其可控性条件证明,Doherty等(Doherty A D. et al. 2000a)也在文章中对量子系统控制的鲁棒性在理论上进行了分析。

从以上的介绍可以看出,量子系统控制的理论研究过程同其他系统控制过程相似,也是经过了一个由可控性和可观性分析,到对各种开环、闭环控制方法研究的过程。虽然经过近二十年的研究,在理论上已经取得了一定的成果,但由于人们对量子系统并不完全了解,所以完整的量子控制理论还没有形成。

1.2.2　量子系统开环控制

早期对量子的控制研究主要集中在物理和化学领域,多用来操纵控制粒子运动,例如改变化学反应的结果。由于当时的设备条件以及闭环控制的复杂性,实验室中大都采用开环控制的方法来实现简单的控制目标。

1988年Peirce和Dahleh(Peirce A P et al. 1988)通过分析实验室中生成分子双极子的客观限制,具体讨论了分子波包的可控性。1989年Shi和Rabitz(Shi S, Rabitz H 1989)提出了一种在谐振分子系统中通过选择合适的最优设计场来有选择地激发特定分子的方法。这种最优设计场结合了分子系统的力学特性,通过控制分子内部能量交换来最终实现分子系统局部激发的目标。他们还提出利用这种

最优设计场可以最终实现对化学反应的控制。同年 Kosloff(Kosloff R et al. 1989)等人具体提出一种根据光脉冲的波形来选择最优控制场的方法,通过这种方法可以有选择的使化学元素按照人们所期望的方向发生反应,并产生相应的生成物。这是量子控制从理论研究向实际应用迈出的重要的一步。随后人们在量子控制化学反应方面做了很多的工作。直到 1993 年 Warren(Warren W S et al. 1993a)等在《科学》上发表文章,对已有的量子开环控制方法进行了总结,并结合当时在激光产生方面的突破,提出了利用激光对量子系统进行开环控制的一些具体方法。

利用对分子系统的开环控制,人们可以在化学上成功的实现一些简单的控制目标。但对于比较复杂的强时变量子系统,开环控制很难满足人们的要求。这是因为要成功的设计开环控制,场函数 $\varepsilon(t)$要基于以下条件:(1)为了准确的描述量子系统的状态,系统的哈密顿量 H_0 必须要被极为准确的测量出来。(2)为了求出系统的控制函数 $\varepsilon(t)$,多维薛定谔方程必须被准确地求解。(3)系统的控制场函数 $\varepsilon(t)$必须可以在实验室的条件下被精确的实现。但是除了一些极简单的量子系统,以上三条假设在实际中都很难被满足。所以在 1993 年以后,人们纷纷把研究的重点转向了闭环控制的方向上,其中最先被研究的就是对量子的学习控制法。

1.2.3　量子系统闭环学习控制

在量子系统闭环控制方法中主要可以分为学习控制和反馈控制两种方法。在量子闭环控制研究的初期,由于当时对量子状态进行无破坏测量理论上还是空白,所以人们把研究的重点放在了对其进行学习控制上。

在利用学习策略对量子系统控制的过程中,遗传算法是被最早研究和最广泛应用的一种算法。1992 年 Judson 和 Rabitz(Judson R S, Rabitz H　1992)提出了量子系统的遗传控制算法,分析了算法中应该利用“遗传压力”(genetic pressure)来阻止控制场中出现对控制输出结果没有影响的量子控制转化,并通过建模来具体说明“遗传压力”对具体控制系统的影响。随后,1997 年 Ardeen(Ardeen C et al. 1997)利用大约 100 代、每一代为 50 个样本来对一个具体的量子系统进行学习,并获得了很好的计算结果,1998 年 Assion(Assion A et al. 1998)也通过遗传算法利用相当多的参量对量子系统进行学习控制。

继提出遗传算法后,Gross 等(Gross P et al. 1993)又于 1993 年提出了量子的梯度学习控制算法。他们通过对所有量子的代价梯度 $\delta J/\delta\varepsilon(t)$求平均,成功地抑制了原先存在于 J 中的噪声,从而得到较精确的梯度 $\delta J/\delta\varepsilon(t)$。他们对梯度学习过程进行建模,并从模型中观测到了很好的鲁棒性。1999 年 Phan 和 Rabitz(Phan H Q, Rabitz H　1999)又提出了利用线性匹配原则来对量子系统进行控制的算法。他们对非线性的量子变量进行了线性化近似,并给出了对其进行匹配迭代的具体算法。

由于量子系统具有高度的非线性特性，所以要对量子系统进行精确控制必须采用非线性的学习算法。美国普林斯顿大学的 Rabitz(Rabitz H　2000)于 2000 年提出了一种非线性学习控制的算法，这种算法克服了线性控制算法的缺点，利用非线性匹配原则来对量子系统的非线性特征进行匹配，以达到对非线性的量子系统进行精确学习的效果，但是报告中只是对其进行了理论上的推导，并没有在实验中证实其可行性。

可以看出，量子学习控制由于具有群体控制、高速控制场转换等一系列优点而被人们广泛的研究，其发展过程总体上经历了一个从理论研究到线性控制，再到最近的非线性学习控制的发展过程。主要研究还是局限在理论上的探索。与此同时，闭环控制中另一个大的体系——反馈控制也随着对量子测量技术的进步而逐步的发展起来。

1.2.4　量子反馈控制与量子估算及克隆理论

反馈控制是经典控制理论的一个重要的组成部分，它通过对系统状态的观测，将获得的系统状态的实际值与期望值进行比较，并通过设计合适的控制律，从而使系统按人们的期望进行动态变化。反馈控制中重要的一个环节就是对其状态进行观测和反馈。对于宏观系统可以通过装置很容易地实现。但是由于量子系统具有不可观测性，采用仪器对其状态的任何测量必将在某种程度上破坏其现有的状态，因此，对量子系统状态进行实时反馈所得到的量子状态值并不等同于测量后的状态值。这就成为了一个很大的难题摆在了人们的面前。尽管量子反馈限定原理(quantum-limited feedback theory)最早于 1994 年就被 Wisemen 和 Milburn 提出，但是由于量子系统的不可观测性，很长一段时间内对其进行的研究并没有很大的进展。因此，这就急需一种方法来解决量子的状态测量问题。

直到 20 世纪 90 年代中后期，随着量子信息技术的提出，世界各国纷纷加大对量子系统研究的力度，对量子测量以及克隆技术取得了一系列研究成果。我国在此方面也处于领先的行列，1998 年段路明和郭光灿(Duan Lu-Ming and Guo Guang-Can　1998)发表了题为“概率克隆和线性独立的量子态辨识”的文章，提出了一种概率量子克隆机的概念，通过把幺正变换同测量过程相结合来达到对量子态进行精确克隆的目的，文章具体描述并证明了如何利用幺正塌缩过程来对两个非正交态的量子进行精确克隆的过程。次年 3 月，Doherty(Doherty A C et al. 1999a)发表文章，结合量子系统的反馈控制过程，具体提出了一种对量子状态进行连续观测以及估计的方法，证实了量子系统反馈控制的可行性。同年 10 月份，张传伟(Zhang Chuan-Wei)(Zhang Chuan-Wei 1999)发表文章具体提出了对量子状态进行识别的一般性策略，这使得人们在对复杂的量子系统进行状态识别以及测量上又前进了一步。2000 年 6 月，他们(Zhang Chuan-Wei 2000)又发表文章总结了

在有限范围内对量子状态进行估计的方法,并在数学上给出了严格的公式证明。

1.2.5　量子反馈控制法

反馈控制是对复杂系统进行控制的常用方法之一,量子系统反馈控制的基本思想与经典反馈控制理论相同,即在量子系统的控制过程中,被控量子的状态不断地被测量并被反馈到控制器中,控制器再根据量子此时的状态及时地调整控制函数以使量子始终保持在期望的轨道上。

Wisemen 和 Milburn 所提出的量子反馈限定原理是一种描述系统动态性能的理论,该理论通过实时反馈的测量信号(当时采用的是光电流)来控制一个量子系统的哈密顿函数。但是由于当时量子状态测量无论在理论上还是在应用上都没有深入研究,所以量子反馈系统一直不能精确地测得系统的哈密顿量,这极大的制约了量子反馈控制理论的发展,所以在对量子闭环控制的初期,反馈控制理论一直让位于学习控制方法,未能成为研究的重点。

直到 20 世纪 90 年代后期,随着量子克隆和量子状态估算理论的突破,量子系统反馈控制才成为研究的重点。1999 年 Doherty(Doherty A C et al. 1999b)发表文章初步讨论了量子反馈控制中的测量问题,重点分析了如何在连续地测量后通过量子跃迁原理来估计量子的状态。同年 6 月 Doherty 发表文章首先分析了以往传统反馈控制理论在量子领域遇到的不可测量等一系列困难,然后提出了通过对反馈变量的分析来对系统状态进行估计的新方法,并应用这种理论来对单自由度的量子系统进行冷却和限制,还同原有的直接反馈的方法相比较,得出结论证实这种新的方法较原有的方法能较大的提高对量子系统的控制精度。最后,把这种方法与经典的 LQG 控制原理进行了对比。

2000 年 Doherty 等人(Doherty A C et al. 2000b)又发表文章详细分析了各种量子系统可观性和可控性,并在把经典系统与量子系统进行对比分析的基础上,提出了三种把经典反馈控制理论量子化的方法,同时还对一些重要的经典控制公式量子化,使其能反映波动性和不连续性等一系列量子系统的特点。同年,Doherty 等(Doherty A C　2000c)还发表文章具体讨论了量子反馈控制的信息提取,把量子系统反馈控制分为测量估计阶段和反馈控制阶段,通过分析一个简单的量子系统模型,讨论了上述两步的最优化实现。

2001 年 Ahn 等人发表文章讨论了如何利用量子反馈控制来纠正量子系统误差的问题。他们利用最优化一个代价函数来对量子系统的哈密顿量进行反馈估计,同时还利用连续测量技术和哈密顿操作来尽量减少估计测量给量子系统带来的干扰。以上这些研究主要适用于符合玻尔-马尔可夫近似的量子系统。2002 年 Doherty 等人又把工作重点放在了利用马尔可夫量子轨迹原理来解决不适用于玻尔-马尔可夫近似的量子系统上的干扰问题。