

文章编号: 1001-0920(2002)05-0513-04

量子控制——一个全新的学科领域

程代展

(中国科学院 数学与系统科学研究院, 北京 100080)

摘要: “量子控制”作为一个全新的学科领域正在蓬勃崛起。为此,首先对量子控制的起源和发展进行概述;然后对量子力学的基本方法和工具作了初步介绍,它提供了量子控制的理论基础和模型框架;接着讨论量子控制与控制论的关系、量子控制系统的模型以及目前国际上的研究动态;最后对未来的研究方向提出一些展望。

关键词: 量子控制; Schrodinger 方程; 李群; 李代数; 现代控制理论

中图分类号: TP 13 **文献标识码:** A

Quantum control——A new academic field

CHEN G Dai-zhan

(Institute of Mathematics and Systems Science, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: “Quantum control” as a brand new academic field is emerging fast. A survey on this new topic is presented. First of all, a brief historical review of the origin and the development of the quantum control is provided. Then a quick introduction to the quantum mechanics is given. It provides the theoretical foundation and the framework for the quantum control. The relationship between the quantum control and the control theory is discussed. The model and major control problems in the quantum control are presented, and the current research situation abroad is described. Finally, a brief prospect is given.

Key words: quantum control; Schrodinger equation; Lie group; Lie algebra; modern control theory

1 概 述

20 世纪 90 年代,量子控制作为 IT 中未来或正在兴起的技术,将许多物理学家、化学家、计算机科学家以及系统与控制学家吸引到自己的麾下。

早在 80 年代初,美国华盛顿大学的谈自忠教授等就提出了量子控制系统的概念,并对其作了大量的理论探索^[1~5]。但在 90 年代以前,还只能处理量子系统的整体,而忽略了单个原子或光子水平的现象,因为人们对其无能为力。90 年代以来,纳米与核

磁共振等技术的发展,特别是扫描隧道显微镜的研制成功,使人们利用激光束对单个原子水平的物质的操纵能力大大提高。这便为量子控制提供了可能,从而促进了它的飞速发展。

什么是量子控制呢? Bucksbaum 教授^[6]认为它是“物理研究的一个新领域。它通过利用精细的控制(目前主要是激光场)操纵量子现象。量子计算、慢光子、原子束及其类似的目标都属于这一新领域——量子控制”。

纳米技术主要是物理学家也许还有计算机科

收稿日期: 2002-04-19; 修回日期: 2002-05-08

基金项目: 国家 973 研究项目(G1998020308)

作者简介: 程代展(1946—),男,福建福州人,研究员,博士生导师,从事非线性控制等研究。

学家和工程师对量子控制的贡献。一种非常普遍的观点认为,信息与生命的基础是纳米科学技术。纳米技术和纳米材料集中体现了微尺寸、复杂结构、高集成度和强相互作用以及高比表面积等现代科学技术发展的特点。最应指出的是,纳米技术和纳米材料是将量子力学效应工程化或技术化的最好场合之一^[7]。纳米技术正蕴育着一场新的工业革命。

目前,化学领域量子控制的研究也十分活跃。量子控制也称相干控制(coherent control)。量子力学中一个著名实验就是双缝衍射实验^[8]。如果有两个或多个光通道,它们对波幅值的贡献依赖于相互的干涉。将这一原理用于化学过程,控制态位(phase),便可确定最后产物的偏向,这就是所谓激光相干控制化学反应。

量子计算机的威力在于它具有巨大的参数空间,它是每个量子比特(quantum bit or qubit)在叠加状态下的态(phase)。人们预测,在不远的将来,计算机程序将利用预先设计的元件自动制造出来,计算机硬件比现在最快的还要快几千倍。量子计算机的成败完全依赖于我们对态的控制能力,包括退相干(decoherence)的抑制。

现在人们普遍相信量子计算机是可行的。但不管最后能否造出量子计算机,对它的研究都会大大提高人们对量子控制理论与技术的理解和掌握,同时也将促进相关量子信息理论与量子计算的发展。

2 量子控制的理论基础——量子力学

量子控制的理论基础是量子力学^[8-13]。20世纪物理学取得的两个划时代的进展是相对论和量子力学。量子力学开辟了人类认识微观世界的道路,奠定了原子弹、核电技术等的基础。没有量子力学与相对论的建立,就没有人类的现代物质文明^[8]。

量子力学的基本度量是波函数 $\Psi(r)$,它描述粒子的位置。量子态粒子在 $r \in \mathbf{R}^3$ 的概率密度为 $|\Psi(r)|^2$,这里假定 $\Psi(r)$ 满足归一化条件

$$\int |\Psi(r)|^2 d^3r = 1 \quad (1)$$

于是,位置 x 的平均值为

$$\bar{x} = \int |\Psi(r)|^2 x d^3r \quad (2)$$

势能 $V(r)$ 的平均值为

$$\bar{V} = \int |\Psi(r)|^2 V(r) d^3r \quad (3)$$

物理量通常用算符表示。如:动量算符 $\hat{p} = -i$

$$\hbar \nabla; \text{动能算符 } \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2; \text{角动量算符 } \hat{l} = r \times \hat{p}; \text{哈密顿算符 } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r).$$

一般说,粒子的力学量 A 的平均值为

$$\bar{A} = \int \Psi^*(r) \hat{A} \Psi(r) d^3r = (\Psi, \hat{A} \Psi) \quad (4)$$

实际上,波函数应依赖于时间,故表示为 $\Psi(r, t)$ 。在上述讨论中,我们只考虑空间性质,故略去 t 。可以证明,不显含 t 的力学量的平均值与 t 无关。

波函数满足的基本关系为 Schrodinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = [-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)] \Psi(r, t) \quad (5)$$

如果势能不显含 t ,则令 $\Psi(r, t) = \Psi(r)f(t)$,代入式(5),得

$$[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)] \Psi(r) = E \Psi(r) \quad (6)$$

式(6)称为时不变 Schrodinger 方程。利用算子,则式(5)和(6)可分别表示为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \hat{H} \Psi(r, t) \quad (7)$$

$$\hat{H} \Psi(r) = E \Psi(r) \quad (8)$$

式(8)中, $\Psi(r)$ 称为能量本征函数, E 称为能量本征值。

量子力学中的一个基本假设^[10]:量子力学中的力学量与一个确定的算符相对应。其含义是:当粒子处于相应算符的本征函数描述的状态(称为本征态)时,该力学量的取值就是相应算符的本征值,它是唯一确定的值。

根据态叠加原理,量子力学中刻画的可观测量的算符均为线性算符。线性算符的乘法为其复合,即

$$AB(\Psi) = A(B(\Psi)), \quad \forall \Psi \quad (9)$$

线性算符的李括号(物理学中称为对易式)定义为

$$[A, B] = AB - BA \quad (10)$$

线性算符对李括号构成李代数,即

$$[A, B] = -[B, A] \quad (11)$$

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C] \quad (12)$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \quad (13)$$

由李导数性质,有

$$[A, [B, C]] = [[A, B], C] + [B, [A, C]] \quad (14)$$

两个波函数 Ψ 和 Φ 的标积定义为

$$(\Psi, \Phi) = \int \Psi^* \Phi \quad (15)$$

这里的积分是对全部空间坐标(\mathbf{R}^3)进行的。

一个算符 \hat{A} 如果满足 $(\Psi, \hat{A}\Phi) = (\hat{A}\Psi, \Phi), \forall \Psi, \Phi$ 则称 \hat{A} 为一个 Hermitian 算符。一个算符为 Hermitian 算符, 当且仅当在任何状态下其平均值均为实数, 即

$$\overline{A} = (\Psi, \hat{A}\Psi) = (\hat{A}\Psi, \Psi) = \overline{A}$$

一个实际可观测的量, 当然要求在任何态下平均值均为实数。因此, 相应算符必为 Hermitian 算符。

Hermitian 算符的本征值为实数, 不同本征值的本征函数正交。

对于任何两个力学量 A 和 B , 有

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} | [A, B] | \quad (16)$$

这个关系称为测不准关系。例如对位置与动量有

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar / 2$$

这便造成测量的不可逆破坏性, 从而使状态反馈控制难以实现。

量子体系的一切可能状态构成一个 Hilbert 空间, 可方便地表示为 Dirac。它包含左矢量 (bra) 和右矢量 (ket)。一个波函数 Ψ 描述的状态记作 $|\Psi\rangle$, 它的共轭态记作 $\langle \Psi|$, $|\Psi\rangle$ 与 $|\Phi\rangle$ 的内积记作

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = (\Phi, \Psi) = \int d\tau \Phi \Psi$$

本征值 λ 的本征态也记作 $|\lambda\rangle$ 。

3 量子控制与控制论

量子控制, 顾名思义应是控制论的一部分, 这是 Wiener^[14] 最初意义下的控制论 —— 一种对万物的驾驭术。我们所谈及的控制理论, 大体上是钱学森等^[15] 描述的对由准确数学模型描述的工程系统进行控制。从这个意义上说, 控制理论应是量子控制的一个组成部分。

首先给出量子控制系统的一般表示形式: 记波函数集合所属的 Hilbert 空间为 \mathbf{H} , 则系统可描述为

$$\begin{cases} i\hbar |\dot{\Psi}(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle, & |\Psi(t)\rangle \in \mathbf{H} \\ y = \overline{C} = \int d\tau \Psi^*(r, t) \hat{C}(t) \Psi(r, t) \end{cases} \quad (17)$$

这里 $H: \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$ 为哈密顿算符, 观测量 $C(t)$ 是某个力学量。设初态为 $|\Psi(0)\rangle$, 则

$$|\Psi(t)\rangle = X(t) |\Psi(0)\rangle \quad (18)$$

这里 $X(t)$ 是发展算子, 满足

$$i\hbar \dot{X}(t) = H X(t) \quad (19)$$

当考虑控制时, H 可由两部分组成: H_0 为系统内部哈密顿算子, 而

$$H_e = \sum_{k=1}^m H_k u_k(t)$$

为外部哈密顿算子。这里 H_k 均为哈密顿算子, $u_k(t)$ 为控制。因此, 量子控制系统一般可表示为

$$i\hbar |\dot{\Psi}(t)\rangle = (H_0 + \sum_{k=1}^m H_k u_k(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (20)$$

通常选定 \mathbf{H} 或其子空间的一组基底, 然后将系统表达为关于发展矩阵算子的方程

$$i\hbar \dot{X}(t) = (\tilde{H}_0 + \sum_{k=1}^m \tilde{H}_k u_k(t)) X(t) \quad (21)$$

这里 \tilde{H}_i 是 H_i 的 Hermitian 矩阵表示。基底多选为一组 H_0 的本征函数。目前使用的控制大多为分段定常函数, 其优点是不改变算子的李代数结构。

对量子控制系统的研究, 目前主要集中在以下几方面:

(1) 量子力学系统的能控性

量子力学系统作为无穷维系统, 能控性是一个首要问题。文献[3]首先给出一个充分条件; [16]在[3]的基础上给出一个新的基于李代数结构的充分条件, 这些条件与非线性系统能控性李代数密切相关; [17]比较了无穷维与有穷维系统能控性的区别, 给出了局部能控的条件。

(2) 非破坏性滤波与观测

文献[3, 5]首次提出并研究了量子系统的滤波与非破坏性的观测器的构造。量子系统的能观性是与可逆性密切相关的。量子系统的能观测性与滤波的一些新进展可参见[18], 量子系统的能观性及与对称性的关系参见[4, 19]。

(3) 量子力学控制系统的结构分析

文献[1]讨论了普通控制系统与量子力学系统的等价性。量子系统的一个重要结构特性是其对称性^[11], 它与量子控制密切相关^[20]。

(4) 控制设计

文献[21]讨论了利用连续测量值的反馈控制; [22]通过相干量子反馈进行控制; [23]讨论了鲁棒控制问题。

(5) 传递函数方法

文献[24]通过对输入 - 输出的描述, 将反馈量子控制系统转化为普通控制系统, 进而求解其控制问题。

(6) 有穷维实现与优化控制

文献[25]考虑二能级量子系统,它相应于量子毕特的逻辑态,即0或1。这样,无穷维的量子控制系统便转换为SU(2)上的控制系统,于是李群上系统的控制理论与方法^[26,27]便可直接应用于量子控制系统。[24]在此基础上研究了有穷维量子控制系统的优化控制问题;[28]则考虑了时间最优控制问题。

(7) 退相干控制

退相干是量子力学系统的一种特殊现象,即系统的叠加态间的相位关系消失,使系统由纯态进入混合态,这意味着系统信息的丧失。因此,退相干控制是量子系统的一种特殊控制。

现在已有许多退相干控制的方法,如对称化方法(symmetrization)、Bang-bang控制^[29,30]和动态抑制^[31]等。

(8) 应用问题

目前,针对量子控制系统的应用及潜在应用的研究十分活跃,最活跃的是针对量子通讯、量子计算与量子计算机的研究^[32,33]。另外,将量子控制系统应用于化学反应的研究也有很多成果^[34]。

4 结 论

目前,量子控制作为一门新的科学与技术分支十分活跃,它的发展可能彻底改变计算机、工业、医学与生命科学等,从而使人类生活发生根本性的变化。量子控制的重点是物理实现,而针对量子控制系统的研究尚停留在理论探讨阶段。随着技术问题的解决,控制设计将越来越重要,量子控制的最后成功将极大地依赖于完善的控制理论和优化控制策略。总之,量子控制是系统与控制学者面临的一个重大机遇,同时也是一个充满刺激的挑战。

鸣谢 承蒙谈自忠教授阅读全文并提出宝贵修改建议,特此致谢。

参考文献(References):

- [1] T J Tarn, G Huang, J W Clark. Modeling of quantum mechanical control systems [J]. *Mathematical Modelling*, 1980, 1(1): 109-121.
- [2] G Huang, T J Tarn. On the controllability of quantum-mechanical systems [J]. *American Institute of Physics*, 1983, 24(1): 2608-2618.
- [3] C K Ong, G Huang, T J Tarn, et al. Invertibility of

quantum mechanical control systems [J]. *Mathematical Systems Theory*, 1984, 17(4): 335-350.

- [4] T J Tarn, M Hazewinkel, C K Ong. Quantum mechanical system symmetry [A]. *Proc 23rd IEEE CDC* [C]. Las Vegas, 1984. 1587-1592.
- [5] J W Clark, C K Ong, T J Tarn, et al. Quantum non-demolition filters [J]. *Mathematical Systems Theory*, 1985, 18(1): 33-55.
- [6] P H Bucksbaum. Particles driven to diffraction [J]. *Nature*, 2001, 413(1): 117-118.
- [7] 张志昆, 崔作林. 纳米技术与纳米材料 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2000.
- [8] 曾谨言. 量子力学导论 第2版 [M]. 北京: 北京大学出版社, 1998.
- [9] 苏汝铿. 量子力学 [M]. 上海: 复旦大学出版社, 1997.
- [10] 熊钰庆, 何宝鹏. 量子力学导论 [M]. 广州: 广东高等教育出版社, 2000.
- [11] W Greiner, B Müller. *Quantum Mechanics: Symmetries* 2nd ed [M]. Berlin: Springer, 1989.
- [12] S Brandt, H D Dahmen. *The Picture Book of Quantum Mechanics* 2nd ed [M]. New York: Springer-Verlag, 1995.
- [13] P R Holland. *The Quantum Theory of Motion* [M]. New York: Cambridge University Press, 1993.
- [14] N Wiener. *Cybernetics* [M]. New York: John Wiley & Sons, 1948.
- [15] 钱学森, 宋健. 工程控制论 修订版 [M]. 北京: 科学出版社, 1981.
- [16] T J Tarn, J W Clark, D G Lucarelli. Controllability of quantum mechanical systems with continuous spectra [A]. *Proc 39th IEEE CDC* [C]. Sydney, 2000. 943-948.
- [17] G Turinici. Controllable quantities for bilinear quantum systems [A]. *Proc 39th IEEE CDC* [C]. Sydney, 2000. 1364-1369.
- [18] J W Clark, T J Tarn. Non-demolition filters for quantum systems [A]. *Proc 40th IEEE CDC* [C]. Orlando, 2001. 287-291.
- [19] P Zanardi. Symmetrizing evolutions [J]. *Physics Letters A*, 1999, 258(1): 77-82.
- [20] B Apagy, Gabor Endredi, P Levay, et al. *Inverse and Algebraic Quantum Scattering Theory* [M]. Berlin: Springer, 1996.
- [21] A C Doherty, S Habib, K Jacobs, et al. Quantum feedback control and classical control theory [J]. *Physical Review A*, 2000, 62(1): 2105-2118.

(下转第 531 页)

掘算法, 为用户进一步获得满意的结果提供了有效手段, 使用户能有效地参与和干预时序数据相似性模式的挖掘过程。我们将算法用于某钢铁企业的电力负荷时序数据, 计算结果表明了算法的有效性。

参考文献(References):

- [1] R Agrawal, M Mehta, J Shafer, et al The QUEST data mining system [A] *Proc of Int Conf on Data Mining and Knowledge Discovery (KDD 96)* [C] Oregon, 1996 244-249
- [2] D J Berndt, J Clifford Finding patterns in time series: A dynamic programming approach [A] *Advances in Knowledge Discovery and Data Mining* [C] Menlo Park: AAAI Press, 1996 229-248
- [3] C Faloutsos, M Ranganathan, Y Manolopoulos Fast subsequence matching in time-series databases [A] *Proc of ACM SIGMOD Conf on Management of Data (SIGMOD 94)* [C] Minneapolis: ACM Press, 1994 419-429
- [4] R Agrawal, Lin K I, Sawhony Shim K, et al Fast similarity search in the presence of noise, scaling and translation in time series databases [A] *Proc of 21st Int Conf on Very Large Data Bases* [C] Zurich, 1995 490-501
- [5] N Roussopoulos, S Kelley, F Vincent Nearest neighbour queries [A] *Proc of ACM SIGMOD* [C] San Jose, 1995 71-79
- [6] R Agrawal, C Faloutsos, A Swarni Efficient similarity search in sequence database [A] *4th Int Conf on Foundations of Data Organization and Algorithms* [C] Evanston, 1993 69-84
- [7] D Rafiei, A Mendelzon Similarity-based queries for time series data [A] *Proc of ACM SIGMOD Conf on Management of Data (SIGMOD 97)* [C] Arizona: ACM Press, 1997 13-25

(上接第 516 页)

- [22] S Lloyd Coherent quantum feedback [J] *Physical Review A*, 2000, 62(9): 2108-2114
- [23] A Doherty, J Doyle, H Mabuchi, et al Robust control on the quantum domain [A] *Proc 39th IEEE CDC* [C] Sydney, 2000 1: 949-954
- [24] M Yanaqisawa, H Kimura Transfer function approach to quantum control systems [A] *Proc 40th IEEE CDC* [C] Orlando, 2001 1595-1600
- [25] D D Alessandro, M Dahleh Optimal control of two-level quantum systems [J] *IEEE Trans on Automatic Control*, 2001, 46(6): 866-876
- [26] R W Brockett System theory on group manifolds and coset spaces [J] *SIAM J Control*, 1972, 10(2): 265-284
- [27] D Cheng, W P Dayawansa, C F Martin Observability of systems on Lie groups and coset spaces [J] *SIAM J Control*, 1990, 28(3): 570-581
- [28] N Khaneja, R Brockett Time optimal control in spin system [J] *Physical Review A*, 2001, 63(3): 2308
- [29] L Viola, S Lloyd Dynamical generation of noiseless quantum subsystems [J] *Physical Review Letters*, 2000, 85(16): 3520-3524
- [30] Ting Yu Decoherence and localization in quantum two-level systems [J] *Physica A*, 1998, 248(3): 393-418
- [31] L Viola, S Lloyd Dynamical suppression of decoherence in two-state quantum systems [J] *Physical Review A*, 1998, 58(4): 2733-2744
- [32] G Alber *Quantum Information: An Introduction to Basic Theoretical Concepts and Experiments* [M] New York: Springer, 2001
- [33] M Hirvensalo *Quantum Computing* [M] New York: Springer, 2001
- [34] I Pastirk, E J Brown, Q Zhang, et al Quantum control of the yield of a chemical reaction [J] *J Chemical Physics*, 1998, 108(11): 4375-4378

《控制工程》征订启事

《控制工程》是东北大学主办的公开发行的学术类双月刊。本刊被选为中国学术期刊综合评价数据库来源期刊, 中国科技论文统计用刊, 中国科学文献数据用刊; 并已进入俄罗斯《文摘杂志》, 英国《科学文摘》, 美国《剑桥科学文献》等国际检索系统。

《控制工程》面向现场实际应用, 反映自动化领域的高技术和最新研究成果, 促进控制理论与控制工程的紧密结合, 加强高等院校、科研院所及工矿企业间在控制工程领域内的

交流与合作。是从事自动控制及相关专业的研究与技术人员了解和交流自动化领域最新成果的窗口与园地。

本刊为双月刊, 大 16 开本, 正文 96 页, 经邮局在全国各地发行, 邮发代号 8—216, 定价 9.00 元, 全年 54.00 元。欢迎各地大中专院校、工矿企业、科研院所、图书馆及自动化同仁到当地邮局订阅。如有漏订, 请随时与编辑部联系办理。

通讯地址: 沈阳市东北大学 310 信箱, 邮编: 110004
电话: 024-23883498, E-mail: kzgcbj@online.ln.cn