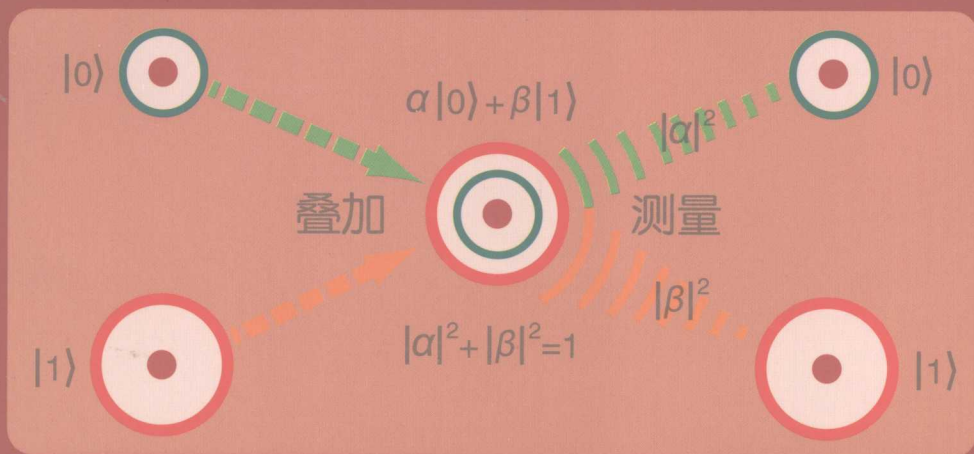


量子计算与量子优化算法

李士勇 李盼池 著

QUANTUM COMPUTATION AND QUANTUM OPTIMIZATION ALGORITHMS

Li Shiyong
Li Panchi



哈尔滨工业大学出版社
HARBIN INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

国家自然科学基金资助项目

量子计算与量子优化算法

李士勇 李盼池 著

哈尔滨工业大学出版社

内 容 提 要

科学家预言：“21 世纪，人类将从经典信息时代跨越到量子信息时代。”创立了一个世纪的量子力学随着 20 世纪 90 年代与信息科学交叉融合诞生的量子信息学，已成为量子信息时代来临的重要标志。

本书是一部研究量子计算与量子优化算法的学术著作。在简要综述国内外该领域研究成果的基础上，主要篇幅介绍了作者近年来取得的创新性研究成果。全书共 8 章，主要内容包括：量子力学基础；量子计算基础；基本量子算法；Grover 量子搜索算法的改进；量子遗传算法；混沌量子免疫算法，量子蚁群算法，量子粒子群算法；量子神经网络模型与算法；量子遗传算法在模糊神经控制器参数优化设计中的应用。

本书由浅入深、深入浅出、可读性好，具有系统性、交叉性、前沿性等特点。为便于学习，书中给出了多种量子优化算法在搜索、优化、聚类、识别与控制中的应用例子，附录给出了主要程序和量子计算常用名词中英对照。本书可作为信息科学、计算机科学、信息与计算科学、控制科学及其自动化、智能信息处理、人工智能等相关专业的高等院校教师、研究生和科研人员学习参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子计算与量子优化算法/李士勇,李盼池著. —哈尔滨:
哈尔滨工业大学出版社,2009.5

ISBN 978 - 7 - 5603 - 2808 - 9

I . 量… II . ①李…②李… III . ①量子力学 ②第五代
计算机 IV . O413.1 TP387

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 007661 号

责任编辑 田新华

封面设计 李士勇

出版发行 哈尔滨工业大学出版社

社 址 哈尔滨市南岗区复华四道街 10 号 邮编 150006

传 真 0451 - 86414749

网 址 <http://hitpress.hit.edu.cn>

印 刷 哈尔滨工业大学印刷厂

开 本 787mm × 1092mm 1/16 印张 15 字数 346 千字

版 次 2009 年 5 月第 1 版 2009 年 5 月第 1 次印刷

书 号 ISBN 978 - 7 - 5603 - 2808 - 9

定 价 38.00 元

(如因印装质量问题影响阅读,我社负责调换)

前 言

众所周知,物质、能量、信息不仅和我们每个人生活息息相关,而且和人类社会发展及科学进步紧密相连,它们始终是贯穿在科学创立与发展过程中的三个最基本而又最重要的概念。宇宙是由物质组成的,而万物都处在运动中,只要物质运动,就需要有能量,能量在作用和转换过程中,就会产生多种多样的物质运动的状态,也就产生了信息。可见,信息是表示物质运动状态的一种属性,信息以物质为载体,以能量为动力。显然,信息既不是物质,也不是能量,但物质、能量和信息三者之间相辅相成,缺一不可。须知,物质之间的交换遵循等价原则,能量之间的转换有损失,而信息之间的交换有增值。因此,在当今高度信息化社会中,信息的表示、传输、存储、处理和利用就显得越来越重要。

传统的计算机采用经典比特 0 和 1 表示信息,它们分别对应着半导体管开、关两种状态。在经典物理中物体运动服从确定性规律,物理量具有确定的值。而微观世界中微观粒子——量子的运动服从统计规律,人们把微观粒子所具有的神奇多变的属性统称为量子态特性。利用微观粒子的状态来表示的信息称为量子信息,信息一旦量子化,描述原子水平上的物质结构及其属性的量子力学特性便成为描述量子信息行为的基础。

量子力学在原子层面上揭示了物质内部原子及其组成的基本粒子的结构和性质。被誉为 20 世纪伟大科学革命之一的量子力学创立尽管已有百年的历史,然而它在信息科学中的应用仅仅始于 20 世纪 90 年代。1994 年,Shor 提出了大数质因子分解量子算法,极大地挑战了 RSA 公共密钥系统;1996 年,Grover 提出了搜索无序数据库的量子算法,该算法比经典算法有 $O(\sqrt{N})$ 的加速。上述两篇重要文献将量子力学与信息科学相交叉、融合,开创了量子计算与量子算法的先河。以量子算法为代表的量子计算由于具有高度的并行性、指数级存储容量和对经典的启发式算法的指数加速作用,它们在计算复杂度、收敛速度等方面明显超过了常规算法。因此,它具有极大的优越性并蕴涵着强大的生命力,具有诱人的研究和应用前景。

量子计算需要在量子计算机上才能得以实现真正意义上的并行运算。尽管目前量子计算机还处于研制的初级阶段,但是将量子信息、量子计算机引入到已有的智能优化算法中去,或者说将传统的进化算法与量子算法相融合,或者说将已有的优化算法引入量子机制被“量子化”后而形成的量子进化算法,在很大程度上加速并提升了算法的优化性能,使其具有不同于传统进化算法的许多优异特点:

1. 量子进化算法基于量子态矢量表示信息,用量子比特的概率幅表示染色体编码,使得一个染色体可以表示成多个量子态的叠加,从而使量子进化计算比传统进化计算更具并行性。

2. 由于单个染色体可以表示多个量子位的叠加,因此,采用量子位编码的进化算法比传统进化算法具有更好的种群多样性,即使选用一个较小规模的量子个体群体,也不影响

算法的性能。

3. 在量子进化算法中,进化操作是通过量子门来实现的,由量子旋转门驱动搜索过程能自动地将全局搜索变为局部搜索,即在粗搜索与精搜索之间保持着良好的均衡、协同搜索能力,从而使得量子进化算法具有极强的全局搜索能力。

4. 采用量子位 Bloch 球面坐标的量子进化算法,由于每个全局最优解可以扩展为 Bloch 球面三组圆周上的无穷多个解,使全局最优解的数量得到极大扩充,从而可以有效地提高量子进化算法获得全局最优解的概率。

量子进化算法的上述优点,使得它已成为国内外信息科学、计算机科学等领域学者研究的热点问题。目前,专门、系统介绍量子计算与量子优化的书籍尚未见到。为了系统总结本书作者在这一领域取得的研究成果,特撰写了《量子计算与量子优化算法》一书,以满足广大相关领域研究人员学习和研究的需要。

全书共 8 章。第 1 章量子力学基础,从量子计算与量子优化需要的角度,介绍量子力学的基本概念、基本假设与数学基础。第 2 章量子计算基础,介绍量子态及其叠加性,量子态的量子比特表示,实现量子态转换功能的量子逻辑门与酉变换。第 3 章基本量子算法,介绍 Deutsch 量子算法,Shor 量子算法,Grover 搜索算法。第 4 章 Grover 搜索算法的改进,重点介绍本书作者提出的改进算法:基于 $\pi/2$ 相位旋转的 Grover 算法,自适应相位旋转的 Grover 算法,目标加权的 Grover 算法,自适应相位旋转目标加权的 Grover 算法,基于固定相位旋转的广义 Grover 算法。第 5 章量子遗传算法,重点介绍作者提出的基于实数编码和目标函数梯度信息的双链量子遗传算法,基于量子位 Bloch 球面坐标的量子进化算法。第 6 章量子群智能优化算法,介绍作者提出的混沌量子免疫算法,量子蚁群算法,量子粒子群算法。第 7 章量子神经网络模型与算法,重点介绍作者提出的一种具有量子输入和实值输出的量子神经元模型与三层量子 BP 网络模型及其算法,基于量子加权的量子神经网络模型与学习算法及其在分类、逼近、参数优化中的应用,基于量子门线路的量子神经网络模型与学习算法及其在模式识别和函数逼近中的应用,量子自组织特征映射网络模型及其在 IRIS 数据聚类中的应用。第 8 章量子遗传算法在模糊神经控制中的应用。

提出本书选题、创意的李士勇教授负责全书的结构设计、章节构思、内容组织等工作,并承担了量子力学基础、量子计算等章节的撰写工作。本书的合作者、在职博士生李盼池副教授完成了量子搜索算法、量子优化算法、量子神经网络等章节初稿的撰写及全部仿真研究工作。李士勇教授对初稿进行反复推敲、修改,最后对全书统稿、定稿。此外,李研、李巍、柳静、章钱、王青、李浩、袁丽英等研究生也为本书提供了一些素材和必要的协助。为了本书内容的丰富和完整,也参考引用了国内外一些专家、学者所取得的研究成果,在此向他们深表谢意!

量子计算及量子优化是一个崭新的研究领域,涉及学科多、交叉多,加之作者们学识有限,本书难免存在缺点和不足之处,敬请广大读者给予批评、指正。

作者

2008 年 12 月

目 录

第 1 章 量子力学基础	1
1.1 从经典力学到量子力学	1
1.2 量子力学发展的回顾	2
1.3 量子力学的基本概念	3
1.3.1 什么是量子力学	3
1.3.2 量子态及其表象	4
1.3.3 量子态的相干叠加性、纠缠性和坍缩	4
1.4 量子力学的基本假设	5
1.4.1 波函数的概率波诠释	5
1.4.2 态叠加原理	6
1.4.3 薛定谔方程	7
1.4.4 算符化规则	7
1.4.5 全同性原理	8
1.5 量子力学的数学基础	8
1.5.1 向量空间与希尔伯特空间	8
1.5.2 狄拉克符号	8
1.5.3 基与线性无关	9
1.5.4 线性算子与矩阵	9
1.5.5 内积、外积、张量积	10
第 2 章 量子计算基础	12
2.1 从经典信息到量子信息	12
2.2 量子比特	13
2.2.1 单量子比特	13
2.2.2 双量子比特	14
2.2.3 多量子比特	15
2.3 量子逻辑门	16
2.3.1 单比特量子门	16
2.3.2 多比特量子门	17
2.3.3 量子门的通用性	18
第 3 章 基本量子算法	21
3.1 量子计算的并行性	21

3.2	Deutsch 量子算法	22
3.3	Shor 量子算法	24
3.3.1	因子分解问题求解的基本思想	24
3.3.2	Shor 算法的实现步骤	24
3.4	Grover 量子算法	26
3.4.1	基于黑箱的搜索思想	26
3.4.2	Grover 算法搜索步骤	27
3.4.3	Grover 算法搜索过程几何描述	28
3.4.4	算法性能分析	29
第 4 章	Grover 量子搜索算法的改进	30
4.1	Grover 算法的国内外研究现状	30
4.1.1	国外研究情况	30
4.1.2	国内研究情况	31
4.2	基本 Grover 算法存在的主要问题	32
4.3	基于 $\pi/2$ 相位旋转的改进算法	34
4.3.1	相位匹配条件的改进	34
4.3.2	改进后算法相位旋转的直观图示	36
4.3.3	改进后的算法描述	37
4.3.4	搜索实例	37
4.4	使用局部扩散算子的量子搜索算法	38
4.4.1	一步迭代搜索	39
4.4.2	算法原理	40
4.4.3	Younes 算法与基本 Grover 算法对比	43
4.5	基于自适应相位旋转的 Grover 算法	45
4.5.1	搜索引擎描述	45
4.5.2	自适应旋转相位的确定	46
4.5.3	搜索举例	48
4.6	基于目标加权的 Grover 算法	50
4.6.1	目标量子叠加态的构造	50
4.6.2	迭代算子的构造	51
4.6.3	算法的迭代方程	51
4.6.4	算法迭代方程的解	52
4.6.5	算法的成功概率	52
4.6.6	目标态概率幅迭代过程动态分析	54
4.6.7	加权 Grover 算法与基本 Grover 算法的关系	54
4.6.8	加权 Grover 算法的实现步骤	55
4.6.9	加权 Grover 算法举例及分析	55
4.7	基于自适应相位旋转的加权 Grover 算法	57

4.7.1	算法原理	57
4.7.2	算例分析	59
4.8	基于固定相位旋转的 Grover 算法	62
4.9	基于固定相位旋转的广义 Grover 算法	64
4.9.1	构造迭代算子	64
4.9.2	算子中 α 参数的确定	64
4.9.3	算法需要的迭代步数	66
4.9.4	广义 Grover 算法与其他算法的关系	66
4.9.5	广义 Grover 算法与其他算法的对比	67
第 5 章	量子遗传算法	69
5.1	量子进化算法的国内外研究现状	69
5.1.1	国外研究现状	69
5.1.2	国内研究现状	70
5.2	基本量子遗传算法	71
5.2.1	算法原理	71
5.2.2	算法结构	72
5.2.3	算法实现过程	74
5.2.4	算法仿真结果	77
5.3	改进的量子遗传算法	78
5.3.1	概 述	78
5.3.2	实数编码梯度量子遗传算法	78
5.3.3	算法描述	82
5.3.4	在求解连续优化问题中的应用	83
5.4	基于量子位 Bloch 球面坐标的量子进化算法	86
5.4.1	概 述	86
5.4.2	BQEA 的基本原理	86
5.4.3	算法描述	93
5.4.4	BQEA 的收敛性	94
5.4.5	在函数优化及模式识别中的应用	95
第 6 章	量子群智能优化算法	101
6.1	混沌量子免疫算法	101
6.1.1	概 述	101
6.1.2	算法原理	102
6.1.3	收敛性分析	105
6.1.4	在求解连续优化问题中的应用	106
6.2	量子蚁群算法	108
6.2.1	概 述	108

6.2.2	算法原理	108
6.2.3	仿真结果及分析	111
6.3	量子粒子群算法	113
6.3.1	概述	113
6.3.2	基本 PSO 算法	113
6.3.3	量子粒子群优化算法	113
6.3.4	仿真结果对比	116
第 7 章	量子神经网络模型与算法	118
7.1	量子神经网络的国内外研究现状	118
7.2	基于通用量子门演化的量子神经网络	119
7.2.1	量子位和通用量子门	120
7.2.2	量子 BP 神经网络模型	121
7.2.3	量子 BP 神经网络学习算法	122
7.2.4	量子 BP 神经网络的连续性	123
7.2.5	在平面点集分类和函数逼近中的应用	124
7.3	基于量子加权的量子神经网络	126
7.3.1	量子加权神经网络模型	127
7.3.2	学习算法	128
7.3.3	在双螺旋线分类及函数逼近中的应用	130
7.3.4	在优化 PID 控制参数中的应用	131
7.4	基于量子门线路的量子神经网络	135
7.4.1	量子门及线路表示	135
7.4.2	量子门线路神经网络模型	136
7.4.3	学习算法	137
7.4.4	在模式识别和函数逼近中的应用	139
7.5	量子自组织特征映射网络	141
7.5.1	量子自组织特征映射网络模型	142
7.5.2	量子自组织特征映射网络聚类算法	143
7.5.3	在 IRIS 数据聚类中的应用	145
第 8 章	量子遗传算法在模糊神经控制中的应用	149
8.1	解析描述控制规则的模糊控制器参数优化	149
8.1.1	模糊控制规则的解析描述	149
8.1.2	模糊控制器参数的量子遗传优化仿真	150
8.2	基于量子遗传算法的模糊神经控制器参数优化设计	152
8.2.1	NFNN 控制器的拓扑结构	153
8.2.2	基于量子遗传算法的 NFNN 控制器参数优化设计	155
8.3	基于状态变量合成输入的 NFNN 控制器参数优化	156

8.3.1	单级倒立摆的数学模型	156
8.3.2	倒立摆模糊控制系统	157
8.3.3	控制器综合系数的确定	158
8.3.4	模糊控制规则的确定	159
8.3.5	NFNN 控制器参数的 DCQGA 优化设计	159
8.4	基于状态变量直接输入的 NFNN 控制器参数优化	164
8.4.1	模糊控制规则的确定	164
8.4.2	NFNN 控制器的 DCQGA 优化设计	165
8.4.3	基于初始摆角 30°下的 DCQGA 优化性能对比	167
8.4.4	变摆杆长度情况下的 DCQGA 优化性能对比	173
8.4.5	基于初始摆角 1°下的 DCQGA 优化性能对比	175
附录 1	部分算法的源程序	179
1.1	Grover 算法成功概率仿真程序	179
1.2	量子遗传算法仿真程序	183
1.3	量子粒子群算法仿真程序	191
1.4	量子自组织特征映射网络聚类算法仿真程序	197
1.5	基于量子遗传算法的倒立摆模糊控制器参数优化仿真程序	204
附录 2	量子计算常用名词汉英对照	212
参考文献	223

第 1 章 量子力学基础

量子力学是反映微观粒子(分子、原子、原子核、基本粒子等)运动规律的理论,它不服从经典力学的确定性规律,而服从统计规律。本章首先介绍量子力学的发展概况、基本概念,其中包括量子态及其表象、量子态的相干叠加性、纠缠、坍缩等;其次阐述了“波函数的概率波诠释、态叠加原理、薛定谔方程、算符化规则、全同性原理”五个基本假设;最后介绍了量子力学的数学基础,包括向量空间与希尔伯特空间、狄拉克符号、基与线性无关、线性算子与矩阵、内积、外积和张量积。上述量子力学的基本内容是量子信息、量子计算和量子优化算法的重要基础。

1.1 从经典力学到量子力学

牛顿(I. Newton, 1642—1727)发表科学史上最伟大的一部著作《自然哲学的数学原理》至今 300 多年。牛顿的伟大功绩在于他的万有引力定律和力学三定律把天体的运动和地球上物体的运动统一了起来,再加上他发明微积分,对光学、化学、自然哲学等多领域的贡献,使他成为近代科学的奠基人。然而,经典科学给我们描绘的是一幅静止的、简单的、可逆、确定的、永恒不变的自然图景,形成了一种关于“存在”的机械自然观。在牛顿力学的基础上,经过拉格朗日、哈密顿、雅可比和泊松等人卓有成效的工作,建立了完备的牛顿力学体系。牛顿力学的建立和一个关键的宇宙常数相联系,即万有引力常数 G 。

爱因斯坦(A. Einstein, 1879—1955)发现,牛顿力学不能反映高速运动的规律,并根据运动的相对性原理和光速不变原理,创立了相对论力学,这是对牛顿力学的第一次重大突破。爱因斯坦的相对论在宇宙高速运动方面突破了牛顿力学,和另一个关键的宇宙常数相联系,即不变的光速 c 。

德国物理学家普朗克(M. Planck, 1858—1947)、法国物理学家德布罗意(L. V. de Broglie, 1892—1987)、薛定谔、玻尔、海森堡、狄拉克等人创立的量子力学是对牛顿力学的第二次突破。量子力学指出,微观粒子的低速运动不遵从牛顿力学的规律,而满足薛定谔方程,它们呈现出特有的波粒二象性,服从一种统计规律^[1],与其相关的物理常数是普朗克常数 h 。

量子理论的提出和建立是 20 世纪人类最伟大的科学成就之一,它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微观领域^[2]。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,并很难用经典的物理理论进行解释。通过量子力学,人们成功地解释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诸如牛顿定律等很多经典物理中的基本定律。因此可以说,量子力学中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^[3]。

量子力学不仅能有效地解释很小尺度范畴内的各种现象,而且在大尺度上,它的预言与经典牛顿力学完全相同。量子力学还能够解释和预言巨大范围内的不同领域的物理体系。近年来,量子力学获得了广泛的应用,如以硅芯片为代表的现代电子工业,就是以称做半导体材料的量子理论为基础的。同样,各种激光设备和器件的出现,仅仅是当我们在量子原理层次明白了光如何从原子上发射出来的机制后,才成为可能,而这方面最早的工作正是爱因斯坦在 1916 年做的。后来,在这方面的进一步研究导致了人们对放射性和核反应的理解^[4]。

有科学家预言,21 世纪,人类将从经典信息时代跨越到量子信息时代。量子力学原理是量子信息学的基础,量子力学揭示了量子态的奇妙特性。利用量子态的叠加性,可将经典比特推广到含复数的量子比特来表示量子信息;利用量子态的相干性,可实现超高速并行量子计算。量子信息与量子计算的深入研究,必将为把量子力学原理应用于量子通信、量子计算机等领域提供广阔的前景。

1.2 量子力学发展的回顾

量子力学的发展经历了旧量子论时期、量子力学的创建与完善期和量子力学向纵深发展的三个阶段,其主要研究成果如表 1.1 所示^[1]。不难看出,在创立和发展量子力学过程中,玻尔、海森堡、玻恩、狄拉克、爱因斯坦、薛定谔、德布罗意等人都作出了杰出的贡献,他们都是公认的量子物理学大师,都因各自的杰出贡献而获得诺贝尔物理学奖。

表 1.1 量子力学发展的三个重要阶段

时期	时间	代表人物	基本学说
旧量子论时期	1900 年	普朗克 (M. Planck, 1858—1947)	提出能量量子化假设和黑体辐射公式
	1905 年	爱因斯坦 (A. Einstein, 1879—1955)	提出光量子假设 提出光的波粒二象性理论
	1913 年	玻尔 (Niels Bohr, 1885—1962)	用定态跃迁假设提出了原子中电子运动的量子理论
量子力学创立和完善期	1918 年	玻尔 (Niels Bohr, 1885—1962)	提出对应原理
	1924 年	德布罗意 (L. V. de Broglie, 1892—1987)	提出电子也具有波动性,波粒二象性是所有微观客体都具有的共同性质
	1925 年	海森堡 (W. Heisenberg, 1901—1976)	建立矩阵力学形式量子力学
	1925 ~ 1926	狄拉克 (Paul Dirac, 1902—1984)	发表《量子力学的基本方程》、《关于量子力学理论》等论文

续表 1.1

时期	时间	代表人物	基本学说
量子力学创立和完善期	1926年	薛定谔 (E. Schrödinger, 1887—1961)	发表《创造波动力学》论文
	1926年	玻恩 (Max Born, 1882—1970)	发表论文指出,薛定谔波函数是一种概率振幅,它的绝对值平方对应测量电子得到的坐标概率密度
	1926 ~ 1927	狄拉克 (P. A. M. Dirac, 1902—1984)	发表《量子力学表象理论》论文,建立了新的量子力学表示理论
量子力学理论纵深发展阶段	1927年	爱因斯坦、玻尔	爱因斯坦坚持对波函数的概率解释引发与哥本哈根学派代表人物玻尔的争论
	1935年	爱因斯坦等	发表被称为“EPR佯谬”的论文
	1963年	贝尔 (J. S. Bell, 1928—1990)	提出了被称为“贝尔不等式的理论”,使“佯谬”进入新阶段
	1975年	狄拉克 (P. A. M. Dirac, 1902—1984)	发表《量子力学的发展》演讲指出,不应该认为现在量子力学的形式是最后形式,认为量子力学的基础还没有真正建立起来

以玻尔为代表的哥本哈根学派观点与以爱因斯坦为代表的反对派观点的争论,直到1955年爱因斯坦逝世后仍在继续。

1.3 量子力学的基本概念

1.3.1 什么是量子力学

量子力学是研究微观粒子性质及其运动规律的理论。微观过程存在于微观世界,而微观世界的客体是通称为量子的微观粒子,它们包括:分子、原子、原子核、电子、质子、中子、夸克等。描述大量微观粒子运动规律的牛顿力学已无能为力,因为,牛顿力学研究的是宏观物体在速度不太高的情况下按确定性轨道运动的规律,而大量微观粒子的运动不同于宏观物体,不服从确定性的规律,它们的行为怪异多变、服从统计规律。

从认识论的层面上看,经典理论属于决定论,而量子理论属于概率论,实际上,决定论只是概率论的一个特例。

在量子力学中的物理量要服从统计规律,必须用态矢空间中的算符表示。一般说来,一个量子态是由某个力学量的多个本征态叠加构成的,测量时我们无法获得它们所有确定的量值,而是以被测量值发生在一定概率区间的概率幅得到它们的某个本征值。概率幅是复数,它的模平方是概率,概率幅具有模量和相角,因此量子状态的叠加还会产生干涉现象。这个干涉现象,宏观世界的人类无法理解,也为微观世界蒙上了神秘的色彩,人类把

微观粒子拥有的那些神奇的属性统称为量子态特性。量子态特性包括量子的波粒二象性、量子态叠加性、量子态纠缠、量子态不可克隆等所谓的量子相干的特性。量子计算和量子通信正是建立在这些量子态特性之上,充分利用量子相干性的独特性质,探索以全新的方式对信息进行计算、编码和传输的可能性,它们也是量子信息学研究的目标之一^[6]。

1.3.2 量子态及其表象

微观粒子的波动性反映微观粒子运动的统计规律,这种波动性德布罗意称其为物质波,也叫做概率波。在量子力学中,常用到的力学量除坐标外,还有动量、能量、角动量等。通常,将微观粒子或粒子体系的状态称为量子态(quantum state)。描述微观粒子运动状态使用波函数 $\psi(\mathbf{r}, t)$, 只要给定波函数, 粒子在 t 时刻出现在位置 \mathbf{r} 附近的概率密度 $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ 就确定了。 $\varphi(\mathbf{p}, t)$ 表示粒子在 t 时刻出现在动量 \mathbf{p} 附近的概率密度幅, 它可以通过 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 通过 Fourier 变换得到。如果只关心粒子的动量, 可以用 $|\varphi(\mathbf{p}, t)|^2$ 表示动量的概率分布函数加以确定。如果省去变量 t , 只要给出波函数 $\psi(\mathbf{r})$, 则粒子的所有力学量的概率分布就确定了, 即 $\psi(\mathbf{r})$ 完全刻画了三维空间中粒子的状态。也就是说, 波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 代表了粒子的量子态。同理, $\varphi(\mathbf{p})$ 也可以刻画同一个粒子的状态, 即 $\varphi(\mathbf{p})$ 也代表了该粒子的量子态。

一个粒子的量子态既可用 $\psi(\mathbf{r})$ 描述, 也可用 $\varphi(\mathbf{p})$ 或其他力学量作变量描述, 它们都是等价的。它们所描述的是同一个量子态, 只不过表达方式不同, 即使用的表象(representation)不同。于是, 称 $\psi(\mathbf{r})$ 为量子态的坐标表象表示, 而 $\varphi(\mathbf{p})$ 为量子态的动量表象表示。不难看出, 表象是态和力学量的具体表达方式。与经典力学中粒子同时具有确定的坐标和动量不同的是, 微观粒子的量子态只能给出力学量的概率分布。微观粒子的坐标和动量不能同时具有确定的值, 故微观粒子不能像经典粒子那样具有确定的运动轨迹, 这也是微观粒子区别于经典粒子的重要特征之一。

1.3.3 量子态的相干叠加性、纠缠性和坍缩

通过波函数可以描述一个粒子或粒子体系所处的状态。为了测量粒子的动量, 每次测量之前不可能判断测量的结果, 也不能预测下一次测量值。也就是说, 测量结果的不确定性是量子力学不同于经典力学的重要特性。测量结果的不确定性源于量子态的叠加性, 叠加的本质在于态的相干性, 因为微观粒子具有波动性, 导致同一个粒子的不同动量的本征态之间是相干的, 这些相干性导致态的叠加。量子态的相干叠加性以及测量结果的概率特性称为态叠加原理。

对于两个粒子或多粒子体系, 如何描述它们的量子态? 通常将两个粒子体系量子态的相干叠加性, 称为纠缠性。例如, 考虑两个二能级原子体系的归一化态函数可以表示多种形式, 如果量子态不能分解成两个单粒子态的直积形式, 即每个原子的状态不能单独表示

出来,则两个原子彼此关联,量子态是两个原子共有的状态,这种量子态被称为**纠缠态**。

在量子力学中对于量子体系进行某一力学量的测量时,测量导致量子体系的相干性被破坏,从而使其由叠加态转化为某一基本态的过程叫做量子态的**坍缩**。例如,如果对二能级原子的量子态进行能量测量,则测量结果必然是 E_1 或 E_2 ,若测到的是 E_1 就表明测量时体系处于本征值为 E_1 的本征态。这就意味着,测量导致体系的相干性被破坏,而使原子体系坍缩到本征值为 E_1 的本征态。上述例子表明,对量子力学中量子体系进行某一力学量的测量时,必然导致体系相干性的破坏和量子态的坍缩,这与经典力学对一个力学量的测量不影响体系状态的情况截然不同。

1.4 量子力学的基本假设

量子力学的创立和发展过程离不开假设和实验,也离不开模型与数学。量子力学中的假设很多,但一般认为最基本的假设有五个:一是波函数的概率波诠释;二是态叠加原理;三是薛定谔方程;四是算符化规则;五是全同性原理。

1.4.1 波函数的概率波诠释

一个微观粒子的状态可以用一个粒子坐标和时间的复函数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 来完全描述,称该复函数为**波函数**。在波函数分布区内小体积元 dV 中找到粒子的概率为 $dP = \psi^* \psi dV$,其中 ψ^* 是 ψ 的复共轭,模平方 $|\psi|^2$ 称为**概率密度**。

在经典力学中,无论是牛顿形式,还是拉格朗日 - 哈密顿形式,都没有给出力学系统运动状态概率分布的概念。但玻尔兹曼在建立统计力学时,把相空间分成许多小的相格,认为每个相格内的 q 和 p 是相同的,因而在同一相格内的粒子运动状态是相同的,不同相格内的 q 和 p 是不同的。不同相格之间 q 和 p 的值是跳跃式变化的。实际上,这是引进了微观粒子运动状态量子化的概念。仿照玻尔兹曼的做法,将经典力学连续运动的状态进行量子化使之成为一系列不连续的分离的运动状态,同一量子状态中的力学运动可以看成是完全相同的,不同量子态之间运动状态的变化是以跳跃方式过渡的。不难看出,玻尔提出的定态跃迁假设可以视为对量子力学波函数概率解释并做出理论分析的先驱。

波函数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 具有如下主要数学性质:

(1) 平方可积条件

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = \text{有限值} \quad (1.1)$$

(2) 对束缚态来说,波函数满足 $\psi(\mathbf{r}, t) |_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$ 。

(3) 要求 $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ 是单值函数。

(4) 波函数及其各阶微商一般要具有连续性(也有例外)。

1.4.2 态叠加原理

在经典物理中波和粒子有严格的区别,因此,其运动不可能既是粒子又是波。为了研究光或电磁波究竟是波还是粒子的问题,托马斯·扬(Thomas Young)利用双缝实验,即一个点光源相继通过带一条狭缝、带两条狭缝的两块屏后,在第三块屏上呈现出明暗相间的条纹,对这个实验的解释证实了光是一种波。1905年爱因斯坦提出了光量子假说,来解释关于光电效应现象。德布罗意支持爱因斯坦的光量子假说,他发现经典力学的哈密顿-雅可比理论与几何光学理论有惊人的相似性,哈密顿-雅可比方程既可以描述粒子的运动,也可以描述光的传播。他意识到既然光波具有粒子的性质,那么物质粒子特别是电子也应当具有波的性质,即**波粒二象性**。

作为粒子,具有动量 p 和能量 E ; 作为波,具有波长 λ 和频率 ν 。对于光量子能量 $E = h\nu$, 动量 $p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$ 。因此,对于实物粒子也具有同样的关系 $p = \frac{h}{\lambda}$, 对于自由粒子而言 $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$, 这个关系称为德布罗意公式, λ 称为实物粒子的德布罗意波长。

波函数描述一个粒子或粒子体系所处的量子态。平面波是单色波,实际上存在的波是各种平面波的叠加。如果一维叠加波 $\psi(x, t)$ 只有在空间的有限区域不为零,则称 $\psi(x, t)$ 为**波包**。自由粒子平面波的波函数描述自由粒子的量子态,它有确定的动量,是动量的本征态。

波包并不具有确定的动量,它是由不同动量的平面波叠加而成,这些不同动量代表同一粒子可取的不同动量值。如果对波包所描述的粒子进行动量测量,则所得到的测量值是许多可能动量中的一个。因此,每次测量前我们都不可能判断出测量结果;每次测量后,下一次的测量值仍然无法预测。这就表明测量结果是不确定的,而能够确定的只是各个动量值出现的概率分布。

测量结果的不确定性来源于量子态的叠加性。例如,用波包描述的量子态是同一粒子不同动量本征态的相干叠加。由于微观粒子的波动性,同一粒子不同动量的本征态彼此间是相干的,这些相干性导致态的叠加。测量结果的概率特性及量子态的相干叠加性原理称为**态叠加原理**。下面通过一个例子说明态叠加原理。

考虑一个二能级原子的两个能级能量分别用 E_1 和 E_2 表示,相应的本征态分别用 ψ_1 和 ψ_2 表示,则态的相干性导致体系的量子态为两态的叠加态,即

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \quad (1.2)$$

不难看出,态叠加原理的数学描述就是线性叠加式。态叠加的本质在于态的相干性,态叠加原理是量子力学的基本假设之一。态叠加原理是根据微观物质的波粒二象性提出的。

1.4.3 薛定谔方程

在经典力学中当质点在某一时刻的状态已知时,由质点的运动方程就可以求出以后任意时刻质点的运动状态。同样,在量子力学中,当微观粒子在某一时刻的状态已知时,以后时刻粒子所处的状态也要有一个方程来决定。所不同的是,在经典力学中质点的状态用质点的坐标和速度来描写,质点的运动方程就是牛顿运动方程;而在量子力学中,微观粒子的状态则用波函数来描述,决定粒子状态变化的方程不再是牛顿方程,而是薛定谔建立的方程,称之为薛定谔方程,即

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + U(r)\psi \quad (1.3)$$

其中 ψ 是波函数, μ 是粒子质量, U 是粒子在力场中的势能, \hbar 为常数, ∇^2 是拉普拉斯算符,其定义为 $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ 。

薛定谔方程是作为一个基本原理给出的,它只适用于相关的粒子是非相对论的(速度远小于光速),而原子中的电子和分子中的原子都属于这类粒子。

1.4.4 算符化规则

经典物理中的力学量在量子力学中可用对应的算符来表示(时间除外),所谓算符是函数到函数的一种映射,它表示一个状态的波函数映射到表示另一个状态的波函数。可见,通过算符的作用实现状态的转移,通过算符对波函数的操作,来确定微观体系中的力学量情况。

由于微观粒子具有波粒二象性,因此描述微观粒子的状态与经典粒子不同,它需要用波函数加以描述。量子力学中的微观粒子力学量,如坐标、动量、角动量、能量等的性质也不同于经典粒子的力学量,经典粒子在任何状态下其力学量都是确定值。而微观粒子由于它的波粒二象性,导致坐标和动量不能同时具有确定值。因此,必须采用和经典力学不同的方式,即用算符来表示微观粒子的力学量。

算符是指作用在一个函数上得出另一个函数的运算符号。设符号 \hat{F} 使函数 u 变为 v , 即 $\hat{F}u = v$, 则符号 \hat{F} 为算符。在量子力学中,算符是波函数到波函数的一种映射,它代表描述量子态波函数的一种运算。量子力学中所用的算符多半是线性厄米算符,即算符 \hat{F} 的共轭转置仍为 \hat{F} 。动量算符和哈密顿算符是两个最常见的算符,它们分别表示为

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla \quad (1.4)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \quad (1.5)$$

算符化规则表明,物理上可观测的坐标、动量、角动量和能量等力学量与相应的算符一一对应。