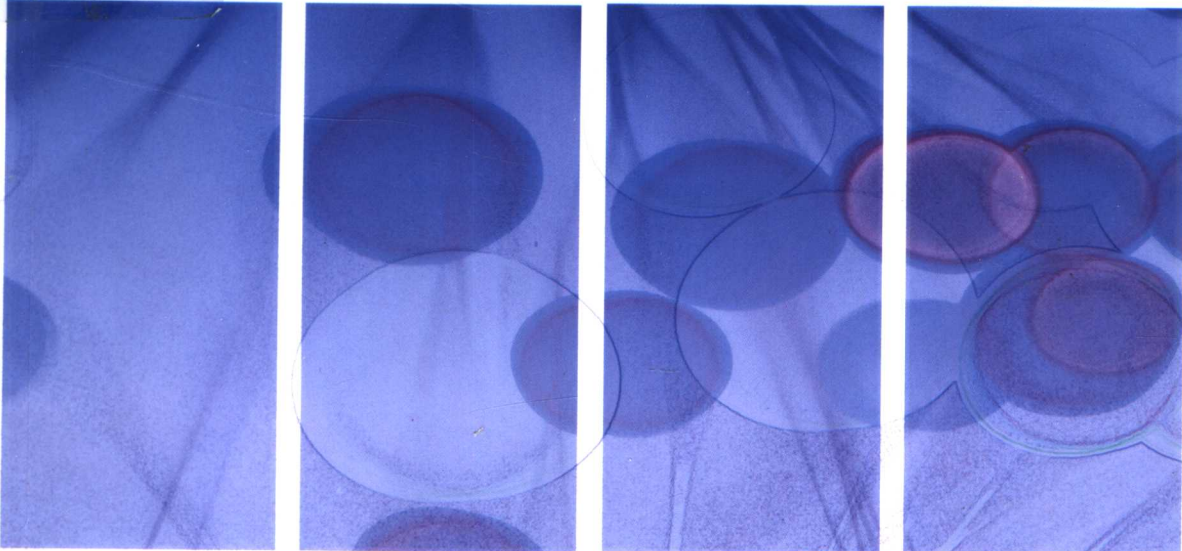


新世纪学术丛书·量子控制



量子控制导论

LIANGZI KONGZHI DAOLUN

陈宗海 董道毅 张陈斌 著

2

中国科学技术大学出版社

量子控制导论

陈宗海 董道毅 张陈斌 著

中国科学技术大学出版社

· 合肥 ·

内 容 简 介

本书从量子控制论的物理基础和数学基础出发, 针对量子控制中的测量问题、量子控制系统的建模与仿真、量子系统的能控性、量子反馈控制和量子最优控制, 结合量子信息科学的最新进展, 全面阐述量子控制的相关理论和方法, 是作者根据自己近几年的研究并结合国内外其他学者的研究成果撰写而成。全书共分八章, 第一章作为绪论简单介绍量子控制论发展的概况, 二、三两章分别对量子控制论的物理和数学基础进行详细的介绍, 第四章介绍量子控制中的测量问题, 第五章对量子控制系统的建模和仿真问题进行了详尽的阐述, 第六章讨论量子控制中的能控性问题, 第七、第八章分别讨论了量子最优控制和量子反馈控制。本书可以作为量子控制研究的入门教材, 也可以供相关专业的研究人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子控制导论/陈宗海, 董道毅, 张陈斌著. —合肥: 中国科学技术大学出版社, 2005.12

(新世纪学术丛书.量子控制)

ISBN 7-312-01863-7

I. 量… II. ①陈… ②董… ③张… III. 量子论—控制论—应用 IV. TP3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 143651 号

书 名: 量子控制导论

著作责任者: 陈宗海 董道毅 张陈斌

责任编辑: 黄 德 张善金

标准书号: ISBN-7-312-01863-7/TP·363

出 版 者: 中国科学技术大学出版社

地 址: 合肥市金寨路 96 号 邮编: 230026

网 址: <http://www.press.ustc.edu.cn>

电 话: 发行部 0551-3602905 邮购部 3602906 编辑部 3602900

电子信箱: press@ustc.edu.cn edit@ustc.edu.cn

印 刷 者: 中国科学技术大学印刷厂

发 行 者: 中国科学技术大学出版社

经 销 者: 全国新华书店

开 本: 787mm×960mm 1/16 印张: 16.25 字数: 406 千

版 次: 2005 年 12 月第 1 版 2005 年 12 月第 1 次印刷

印 数: 1—3000 册

定 价: 25.00 元



陈宗海

安徽省桐城市人。现为中国科学技术大学自动化系教授、博士生导师。享受国务院政府特殊津贴的专家。

1988年毕业于中国科学技术大学系统科学与管理科学系。1991年在中国科学技术大学控制理论与控制工程专业，获硕士学位。1991年留校任教，从事控制科学与工程领域的教学与科研工作，主要研究领域为：复杂系统建模与控制、智能科学与技术、量子控制论等，现担任中国自动化学会理事，中国系统仿真学会常务理事，中国自动化学会系统仿真专业委员会主任，中国计算机用户协会仿真应用委员会副理事长。先后承担了国家自然科学基金项目、部委重点实验室基金项目、985工程建设项目、省市科技计划项目、人才基金项目以及若干大中型企业科技攻关项目等。已获得省部级科技进步奖12项，发表学术论文200余篇，出版学术著作2部。2000年获得中国科学院盈科优秀青年学者奖。

前言

著名的理论物理学家和作家保罗·戴维斯（Paul Davis）曾经预言：

19 世纪是机械时代，20 世纪在历史上将被称为信息时代。

我相信 21 世纪将会是量子时代。

量子力学的诞生深刻地改变了人类社会：在 20 世纪推动了社会发展的核能、激光、半导体等高科技，都源于量子力学。在量子力学基础上的量子信息学的建立，是物理学与信息科学相结合的一门新兴交叉学科领域，涉及物理、数学、计算机、通信、工程和材料等多门学科。它的未来发展势必将对整个基础科学和工程科学，包括计算机科技、通讯科技、材料工程、精密测量技术、量子基础科学及信息论科学带来一次巨大的变革。台湾成功大学教授张为民博士在其文章《量子信息科学的发展与展望》的结束语中说到：*如果说 20 世纪的第三次工业革命是结合微电子学技术、超大规模集成电路制造技术与计算机技术和通讯网络技术而形成今天的“电子工业”（即半导体工业），那么毫无疑问，现在的第四次工业革命将是结合纳米技术、纳米组件制造技术与量子计算技术和量子通讯技术而形成未来的“量子工业”（Quantum Industry）。*

量子信息学采用量子态作为信息单元，对量子信息的处理实质上是对量子态的操纵，因而对量子系统状态的主动控制就显得特别重要。实际上，量子控制并非一个新的名词，伴随着量子力学的诞生，物理学家和化学家们凭借科学直觉和丰富的经验对量子系统进行控制和操纵，并且已经在量子光学、原子物理、选键化学等方面取得了许多重要成果。然而，随着量子信息技术和量子计算的不断发展，光靠直觉和经验已经不再能适应对复杂量子系统进行操纵和控制的要求，这就需要从控制论的角度对微观量子系统的行为进行建模、分析和主动控制，于是量子控制论应运而生，并将成为全面实现“量子工业”时代这一目标的重要学科。

在量子领域，由于纠缠态和叠加态的存在，对量子态的测量会导致关联量子态的塌缩，量子不可克隆定理使得任意未知量子态无法精确复制，同时，环境也易影响量子系统使其发生消相干。经典控制论已无法适应量子信息学发展的要求，必须从新的角度，采用新的方法来解决对量子系统状态的主动控制问

题。这一新兴学科最近几年来被世界各国逐渐重视并迅速发展起来,然而量子控制论的研究尚处于起步阶段,还未形成成熟的理论。

量子控制论作为一门新兴的交叉学科,涉及物理、化学、生物学、信息科学等众多领域,包涵的内容十分丰富,但一切梦想的实现都需要从对每一个量子系统进行控制及对量子态进行操纵开始。本书从控制论、信息论和物理学三方面入手,利用经典控制论中的思想,结合量子信息领域的一些研究成果,在量子控制系统的设计和分析、理解系统中量子信息流的流向和性质以及具体化量子控制的性能指标等方面,为读者展现了量子系统状态的主动控制和量子态操纵的基本理论、方法和手段。此外,量子控制中特有的纠缠现象、量子相干性、量子叠加性等将为控制论注入新鲜血液,适当的将量子方法引入经典系统,有可能更方便地解决一些复杂经典系统的控制问题。本书可以为您探索“泛控制”科学领域,起到抛砖引玉的作用。

我是在“文化大革命”的浪潮中接受的小学教育,在改革开放初期接受的中学和大学教育,在国民经济全面发展的形势下成为了一名教书育人的大学教师。我从农村来到城市,经历了近乎原始的面朝黄土背朝天的农业生产、滚滚浪潮式的技术引进和全面稳定的知识创新、技术创新及知识经济时代到来的全过程。每每想起简单纯朴而遐想连篇的童年生活、坦荡求知并对未来充满希望的学生时代以及面对一张张充满求知渴望的脸的育人课堂,我的责任感油然而生,从不敢也不愿有半点懈怠,生活中哪些无奈而又无聊的人和事都成为了过眼烟云。在这里,我感谢我的已经作古的父母陈问渊先生和汪银华女士对我的悉心抚育,感谢我的叔叔陈问径先生的谆谆教诲,感谢我的妻子杨晓宇女士在各方面给予我无微不至的关怀,特别是事业上的支持和理解,没有她的热情付出,要完成这部著作是很难的。在这本书写作过程中,我的博士生董道毅和张陈斌做了大量的工作,没有他们的努力,这本著作的面世将会滞后相当多的时间,故成为该书的合著者。此外,我的学生吴庆林、陈春林、李明等也为本书的出版贡献了他们的聪明和才智,在此一并表示诚挚的谢意。

这是一本关于研究量子系统控制和量子态操纵的入门参考书,也是一本教材。书中在材料取舍、编排和叙述上的偏颇、不当甚至错误都会存在,在此敬请指正。

陈宗海

2005年10月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 量子控制论产生的背景	1
1.2 量子控制论的基本内容	3
1.3 量子控制论的特点	4
1.4 量子控制实验研究现状	6
1.5 量子控制理论研究现状	8
参考文献	12
第 2 章 量子控制论的物理基础	19
2.1 微观物质的波粒二象性	19
2.1.1 光的粒子性实验	19
2.1.2 粒子的波动性实验	20
2.1.3 波粒二象性	22
2.2 几率波与几率幅	23
2.3 不确定性关系	25
2.4 量子力学公设	26
2.4.1 波函数公设	26
2.4.2 算符公设	27
2.4.3 测量公设	27
2.4.4 Schrödinger 方程公设	28
2.4.5 全同性原理公设	28
2.5 态叠加原理	28
2.6 Schrödinger 方程	30
2.7 算符与平均值	31
2.8 表象	34
2.8.1 坐标表象	34
2.8.2 动量表象	35
2.8.3 能量表象	36

2.9 电子自旋与泡利矩阵	36
2.9.1 电子自旋	36
2.9.2 泡利矩阵	38
2.10 纯态与混态	40
2.11 量子纠缠	43
参考文献	45
第3章 量子控制的数学基础	47
3.1 矢量空间	47
3.1.1 矢量空间	47
3.1.2 内积空间	50
3.1.3 希尔伯特空间	51
3.2 矢量的表示	52
3.2.1 矢量的矩阵表示	52
3.2.2 Dirac 符号	54
3.3 算符	56
3.3.1 算符	56
3.3.2 右矢空间中的算符	57
3.3.3 算符的代数运算	59
3.3.4 左矢空间中的算符	60
3.3.5 厄米算符和幺正算符	61
3.3.6 投影算符	63
3.3.7 本征值和本征矢量	64
3.4 算符的矩阵表示	66
3.4.1 表象	66
3.4.2 线性算符的矩阵表示	67
3.5 矢量空间的直和与直积	69
3.5.1 直和空间	69
3.5.2 直和空间中矢量和算符的矩阵表示	70
3.5.3 直积空间	71
3.5.4 直积空间中矢量和算符的矩阵表示	72
3.6 李群和李代数	73
3.6.1 群	73

3.6.2 子群	74
3.6.3 群的同构	75
3.6.4 拓扑空间	75
3.6.5 微分流形	77
3.6.6 李群	80
3.6.7 李代数	81
参考文献	82
第4章 量子控制中的测量问题	83
4.1 测量公设分析	83
4.2 正交投影测量—von Neumann 模型	87
4.3 广义测量和 POVM	89
4.4 量子非破坏性 (QND) 测量	93
4.5 量子检测仪	95
4.5.1 量子检测仪	95
4.5.2 Stern-Gerlach 装置	97
4.5.3 量子系统辨识	98
4.6 量子传感器	99
4.6.1 量子传感器的概念与现状	99
4.6.2 量子传感器的性能分析	102
参考文献	103
第5章 量子控制系统的建模与仿真	107
5.1 量子控制的四种模型	107
5.1.1 量子控制系统的结构模型	108
5.1.2 量子控制系统的微分方程模型	109
5.1.3 量子控制系统的传递函数模型	110
5.1.4 量子控制系统的状态空间模型	111
5.2 量子控制系统的建模	113
5.2.1 直接机理建模法	113
5.2.2 量子化建模法	114
5.3 量子系统的仿真	119
5.3.1 概述	120
5.3.2 量子仿真的分类	121

5.3.3 基于经典计算机的量子仿真.....	123
5.3.4 量子仿真算法	125
5.3.5 量子蒙特卡罗方法	127
5.3.6 前景	128
5.4 量子控制系统的仿真研究	129
5.4.1 量子控制系统仿真的平台.....	129
5.4.2 量子控制系统仿真的一般步骤.....	131
5.4.3 进一步考虑的一些问题.....	132
5.4.4 研究展望	133
参考文献	133
第 6 章 量子系统的能控性	139
6.1 矩阵群	139
6.2 矩阵李群及其李代数	145
6.3 有限维双线性模型	153
6.4 能控性的定义	155
6.4.1 算符能控性	155
6.4.2 纯态能控性	156
6.4.3 等价状态能控性	158
6.4.4 密度矩阵能控性	158
6.4.5 四种能控性的关系	160
6.5 波函数能控性	162
6.5.1 波函数能控性的定义	162
6.5.2 连通关系图	163
6.6 本征态能控性	165
6.6.1 本征态能控性的定义	165
6.6.2 有限维本征态能控系统的开环控制.....	168
6.7 量子能控性研究的展望	173
参考文献	173
第 7 章 量子反馈控制	177
7.1 开环控制: 一个例子	177
7.2 开环控制与闭环控制	182
7.3 马尔可夫量子反馈	185

7.4 贝叶斯量子反馈	188
7.5 含时延非马尔可夫量子反馈	192
7.6 相干量子反馈控制	194
7.6.1 量子相干控制	194
7.6.2 相干量子反馈	195
7.7 基于克隆与识别的量子反馈控制.....	199
7.7.1 量子不可克隆定理	199
7.7.2 量子态的识别	200
7.7.3 基于克隆与识别的量子反馈.....	204
参考文献	207
第8章 量子最优控制	215
8.1 最优控制的一般形式	215
8.2 量子最优控制的目标函数	216
8.3 分子系统的量子最优控制	218
8.4 两能级系统的量子最优控制	220
8.5 Liouville 空间的量子最优控制.....	224
8.6 量子最优控制解的迭代求法	227
8.7 小结	229
参考文献	229
名词索引	233
符号表	243

Content

1	Introduction.....	1
1.1	Research background of quantum control theory	1
1.2	Foundational contents of quantum control theory	3
1.3	Characteristics of quantum control theory	4
1.4	Research actuality of quantum control in experiments	6
1.5	Research actuality of quantum control theory	8
	References.....	12
2	Physical foundations of quantum control theory	19
2.1	Wave particle duality of micro-matter	19
2.1.1	Particle experiment of light.....	19
2.1.2	Wave experiment of particle	20
2.1.3	Wave particle duality	22
2.2	Probability wave and probability amplitude	23
2.3	Uncertainty relation	25
2.4	Quantum mechanics postulates.....	26
2.4.1	Wavefunction postulate.....	26
2.4.2	Operator postulate	27
2.4.3	Measurement postulate	27
2.4.4	Schrödinger equation postulate.....	28
2.4.5	Identical principle postulate.....	28
2.5	State superposition principle.....	28
2.6	Schrödinger equation	30
2.7	Operator and expectation	31
2.8	Representation	34
2.8.1	Coordinate representation	34
2.8.2	Momentum representation	35
2.8.3	Energy representation	36

2.9	Electron spin and Pauli matrix	36
2.9.1	Electron spin	36
2.9.2	Pauli matrix	38
2.10	Pure state and mixed state	40
2.11	Quantum entanglement	43
	References	45
3	Mathematical foundations of quantum control theory	47
3.1	Vector space	47
3.1.1	Vector and vector space	47
3.1.2	Inner product space	50
3.1.3	Hilbert space	51
3.2	Representation of vectors	52
3.2.1	Matrix of vectors	52
3.2.2	Dirac symbol	54
3.3	Operator	56
3.3.1	Operator	56
3.3.2	Operator of ket space	57
3.3.3	Algebraic operation of operator	59
3.3.4	Operator of bra space	60
3.3.5	Hermitian operator and unitary operator	61
3.3.6	Projection operator	63
3.3.7	Eigenvalue and eigenvector	64
3.4	Matrix of operator	66
3.4.1	Representation	66
3.4.2	Matrix of linear operator	67
3.5	Direct sum space and direct product space	69
3.5.1	Direct sum space	69
3.5.2	Vector and operator of direct sum space	70
3.5.3	Direct product space	71
3.5.4	Vector and operator of direct product space	72
3.6	Lie group and Lie algebra	73
3.6.1	Group	73

3.6.2	Subgroup.....	74
3.6.3	Isomorphism of groups	75
3.6.4	Topological space.....	75
3.6.5	Differential manifold	77
3.6.6	Lie group.....	80
3.6.7	Lie algebra	81
	References.....	82
4	Measurement in quantum control	83
4.1	Analysis of measurement postulate	83
4.2	Orthogonal projection measurement--von Neumann model.....	87
4.3	Generalized measurement and POVM.....	89
4.4	Quantum nondemolition (QND) measurement.....	93
4.5	Quantum detector.....	95
4.5.1	Quantum detector.....	95
4.5.2	Stern-Gerlach apparatus.....	97
4.5.3	Quantum system identification	98
4.6	Quantum sensor	99
4.6.1	Conception and actuality of quantum sensor	99
4.6.2	Performance analysis of quantum sensor.....	102
	References.....	103
5	Modeling and simulation of quantum control systems	107
5.1	Four kinds of models for quantum control.....	107
5.1.1	Structural model of quantum control systems.....	108
5.1.2	Differential equation model of quantum control systems	109
5.1.3	Transfer function model of quantum control systems.....	110
5.1.4	State space model of quantum control systems.....	111
5.2	Modeling of quantum control systems.....	113
5.2.1	Direct mechanism modeling method	113
5.2.2	Quantization modeling method.....	114
5.3	Simulation of quantum systems	119
5.3.1	Introduction.....	120
5.3.2	Classification of quantum simulation	121

5.3.3	Quantum simulation based on classic computers.....	123
5.3.4	Algorithms of quantum simulation	125
5.3.5	Quantum Monte Carlo	127
5.3.6	The future of quantum simulation.....	128
5.4	Simulation research of quantum control system	129
5.4.1	Platform of reseach	129
5.4.2	General process of simulation.....	131
5.4.3	A few more problems	132
5.4.4	Future views.....	133
	References.....	133
6	Controllability of quantum control systems	139
6.1	Matrix group	139
6.2	Matrix Lie group and its Lie algebra	145
6.3	Finite-dimensional model	153
6.4	Definiton of controllability	155
6.4.1	OC(Operator Controllability).....	155
6.4.2	PSC(Pure State Controllability).....	156
6.4.3	ESC(Equivalent State Controllability).....	158
6.4.4	DMC(Density Matrix Controllability).....	158
6.4.5	Relation of four kinds of controllability	160
6.5	Wavefunction controllability	162
6.5.1	Definition	162
6.5.2	Connectivity graph.....	163
6.6	Eigenstate controllability	165
6.6.1	Definition	165
6.6.2	An open loop control algorithm for finite-dimensional eigenstate controllable systems.....	168
6.7	Future research of quantum controllability	173
	References.....	173
7	Quantum feedback control.....	177
7.1	Open loop control: An example.....	177
7.2	Open loop control and closed loop control	182

7.3	Markovian quantum feedback.....	185
7.4	Bayesian quantum feedback	188
7.5	Non-Markovian quantum feedback with time delay.....	192
7.6	Coherent quantum feedback control	194
7.6.1	Quantum coherent control.....	194
7.6.2	Coherent quantum feedback	195
7.7	Quantum feedback control based on cloning and recognition	199
7.6.1	Quantum no-cloning theorem	199
7.6.2	Recognition of quantum state	200
7.6.3	Quantum feedback based on cloning and recognition	204
	References.....	207
8	Quantum optimal control.....	215
8.1	General expression of optimal control.....	215
8.2	Objective function of quantum optimal control.....	216
8.3	Quantum optimal control of molecular systems	218
8.4	Quantum optimal control of two-level system.....	220
8.5	Quantum optimal control in Liouville space.....	224
8.6	Iterative solution of quantum optimal control.....	227
8.7	Conclusion	229
	References.....	229
	Term index.....	233
	Symbol list	243

第 1 章 绪 论

介绍量子控制论产生的背景，阐述其研究内容和特点，概述量子控制的实验和理论研究现状。

随着科学技术的进步，人们对客观世界的认识不断深入，所认识和改造的客观对象呈现两种主要趋势，一是不断复杂化，从一般系统到大系统，再到复杂巨系统；另一种趋势是微观化，从纳米体系到分子系统，再到单个光子和电子。近年来，随着计算机芯片的不断小型化、信息通信网络负载的不断增加以及选键化学、基因工程、纳米科学等学科发展的需要，人们对微观系统的研究越来越感兴趣，然而，微观的量子系统，都必须遵循量子力学规律，目前蓬勃发展的量子通信（quantum communication）、量子计算（quantum computation）都是在量子理论的框架下展开。在不断深入认识微观世界的同时，人们也期望能很好的改造微观世界以更好的为人类服务，许多物理学家、化学家已经开始开展这方面的工作，但为了让量子计算机、量子通信网络等真正走入寻常百姓家，还需要发展量子控制理论（quantum control theory），从而在系统论观念的指导下探索更普遍化、更实用化的量子系统控制方法和技术，以提高人们改造微观世界的能力。

1.1 量子控制论产生的背景

量子理论的创立是 20 世纪人类最辉煌的成就之一，它揭示了微观领域物质的结构、性质和运动规律，把人们的视角从宏观领域引入到微观系统。从 19 世纪末到 20 世纪 30 年代的一系列著名实验，如黑体辐射（black body radiation）、光电效应（photoelectric effect）、康普顿散射（Compton scattering）、电子杨氏