文章编号: 1001-0920(2004)10-1105-04

量子系统控制中状态模型的建立

从 爽
(中国科学技术大学 自动化系, 安徽 合肥 230027)

摘 要: 从控制的角度出发, 通过将量子力学系统的态矢波函数和密度矩阵算符转化为几何空间状态的演化矩阵, 对量子力学系统和系综进行了可实现的理论建模, 从而将一个抽象的物理概念的操纵问题, 转变成一个实在的易于数学操作和控制处理的几何空间状态的控制设计问题 最后给出了基于所建模型可进一步解决的有关量子系统控制的 5 个基本问题

关键词: 量子系统控制; 状态模型; 波函数; 密度矩阵
中图分类号: TP202 **文献标识码**: A

Establishment of state space model in quantum systems control

CONG Shuang
(Department of Automation, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China. E-mail: scong@ustc. edu. cn)

Abstract: A model of quantum mechanical systems and its ensemble are established from control theory viewpoint. The state vector of wave function and density matrix of quantum mechanical systems are transformed into evolution matrix state of geometry space. The manipulation problem of an abstract physical concept is changed into a control design problem on a state of geometry space, which is easy to deal with mathematically and suitable for control. Finally, five basic problems about quantum sysetms control, which may be solved based on the model, are presented.

Key words: quantum systems control; state model; wave function; density matrix

1 引 言

理论和实验研究证实, 量子信息在提高运算速度、确保信息安全、增大信息容量等方面, 可以突破现有信息系统的极限 正因为如此, 量子系统已引起世界各国学术界的高度重视 激光技术和微电子学领域中科学与技术的进步, 激发人们不断地进行有关量子力学系统控制的研究[1,2]. 从控制理论的角度看, 量子控制在量子计算等方面具有广阔的应用前景 实际上, 通过有限维数的系统复数状态所携带的量子信息, 是通过操纵系统状态到达指定的目标态而传递的 物理学家在腔量子电动力学(C-QED)场和离子囚禁实验中, 已开发出具体的量子系统 它能通过极低的噪音连续不断地被监视, 可在系统的时间域内对其量子态进行快速操纵 因此, 自然使人们考虑使用控制理论与技术对具体量子力学系统进行控制的可能性 相对于经典力学系统的控制, 量子力学系统控制的难点主要在于以下 3 个方面:

1) 所涉及的数学十分复杂 基于薛定谔方程的系统模型在控制上是非线性的, 而且系统的物理状态并不是落在普通的欧基里德坐标系上, 而是落在一个投影复数空间中. 各种状态具有等价的类别, 即所要处理的矢量并不能以经典控制的方式来表示状态, 因为它们不是唯一确定的

2) 不能以通常的方式运用经典控制理论, 因

收稿日期: 2003-10-29.
基金项目: 安徽省自然科学基金资助项目(2003kj048zd).
作者简介: 从爽(1961—), 女, 山东文登人, 教授, 博士生导师, 博士, 从事人工神经网络、智能控制等研究

为在对状态的测量过程中会出现"波函数塌缩"现象. 量子系统中每一个可以测量的量称为可观测的量, 它与一个具有可被测量的本征值的算符相关联. 包含在薛定谔方程中的状态仅含有每一测量结果的已知概率. 根据量子力学的解释, 当某一测量值已知时, 系统状态的本征矢量与所测量的本征值相对应, 即在本征空间内"塌缩". 此时就不能不慎重地考虑用于控制过程中基本的反馈原理.

3) 每一个量子粒子与周围的环境(包括外加的控制量) 相互作用, 这种相互作用是经典控制中所不存在的, 必须慎重地考虑和对待.

量子力学系统控制的主要目的是寻找一条量子系统时间演化的途径. 目前所涉及的研究方向, 具体可分为 5 个方面: 1) 某一初始化纯态的制备; 2) 可控性分析; 3) 驱动一个给定的初态到达事先确定的终态(目标态); 4) 最优化一个可观测的目标期望值; 5) 量子状态的非破坏性测量. 无论希望达到何种目的, 当对量子力学系统进行分析和控制时, 都必须对控制系统进行建模, 然后针对所建立的系统模型进行分析和控制器设计.

本文的目的是从控制的角度出发, 对量子力学系统进行理论建模, 为以后的系统分析和设计作好准备. 本文仅考虑具有有限维的量子系统模型建立的问题.

2　量子系统模型的建立

量子系统控制的思想[3,4] 是基于能改变系统及控制器之间的相互作用的假定. 这意味着人们能操纵一个(可能是取决于时间的) 哈密顿(算符) H, 或系统内部的哈密顿通过与外部接触作用于系统的哈密顿上. 有时假定至少能找到一个微扰动的哈密顿[3]. 所谓微扰动是指外部所施加的控制(扰动) 作用的影响足够微弱, 不足以导致量子系统内部粒子能级等特性的跃变. 这种思想在许多现实的物理系统中已被证实是可行的.

为了对量子系统进行建模, 通常对一个量子系统的状态不是仅使用一个矢量而是使用一组矢量, 即采用复希尔伯特空间 H 中的一个矢量空间. 采用 Dirac 符号法来表示一个状态矢量, 这个态矢的右矢写作 $\langle\psi| \in H$, 而与其对等空间的矢量称为左矢, 写作 $\langle\psi| \in H^*$ $(H \cong H^*)$. 左矢是右矢的共轭转置.

在 t 时刻, 量子力学系统的状态 $|\psi(t)\rangle$ 的演化由薛定谔方程决定, 即

$$i\hbar\ |\dot{\psi}\rangle = H\ |\psi\rangle. \tag{1}$$

其中: $\hbar$ 是普朗克常数; $H: H \to H^*$ 是哈密顿算符, 且 $H = H^*$. 因此其本征值为实数.

如果 $|\psi(t)\rangle$ 满足式(1), 则 $|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{i\theta}|\psi(t)\rangle$ 也满足式(1). 因此, 薛定谔方程是不随相位的变化而变化的. 然而, 当 θ 为时间的一个复函数时, $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ 虽然与 $\psi(t)\rangle$ 代表同样的状态, 但不再是式(1) 的解. 为解决这一问题, 本文采用一种较简单的方法: 选用归一化的矢量 $|\psi(t)\rangle$, 即假定 $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$, 并且要求所推导的所有结果都独立于相位.

有多种不同的图景表示方式可实现量子态的逻辑操作, 通过对幺正演化算符的操纵达到对态矢 $|\psi(t)\rangle$ 的操纵是其中一种可能的方式. 本文通过量子系统的幺正演化算符来达到所期望的控制目的. 对于具有初始条件 $|\psi(0)\rangle$ 的情况, 采用幺正演化算符 $X(t)$ 可得到薛定谔方程的解

$$|\psi(t)\rangle = X(t)\ |\psi(0)\rangle. \tag{2}$$

演化算符 $X(t)$ 同样满足方程

$$i\hbar\ \mathring{X}(t) = H X(t). \tag{3}$$

因此, 演化算符 $X(t)$ 意味着在态矢 $|\psi(t)\rangle$ 上实施控制的操作.

下面讨论方程(1) 中的哈密顿算符 H. 系统的哈密顿假定由未受扰动的(或内部的) 哈密顿 H_0 与受微扰动的(或外部的) 哈密顿 $H_e(t)$ 之和的形式组成, 即

$$H = H_0 + H_e(t). \tag{4}$$

其中: $H_e(t) = \sum_{k=1}^{m} H_k u_k(t)$, $H_k(t)\ (k = 1, 2, \cdots, m)$ 为厄米线性算符 $H_k: H \to H$; $u_k(t)$ 为实函数, 通常代表外加的电磁场, 是输入的控制量.

在式(4) 的作用下, 系统状态 $|\psi(t)\rangle$ 的薛定谔方程变为

$$i\hbar\ |\dot{\psi}\rangle = \left(H_0 + \sum_{k=1}^{m} H_k u_k(t)\right) |\psi\rangle. \tag{5}$$

与式(5) 相对应的演化算符 $X(t)$ 方程为

$$i\hbar\ \mathring{X}(t) = \left(\overline{H}_0 + \sum_{k=1}^{m} \overline{H}_k u_k(t)\right) X(t). \tag{6}$$

此时, 可将问题转化为对具有初始条件 $X(0) = I$ 的系统(6), 考虑其状态的演化或操纵问题. 对 $X(t)$ 的操纵是操纵系统(5) 的状态到达期望终态的一条途径.

定义 $\tilde{A} := (1/i\hbar)\overline{H}_0$, $\tilde{B}_k := (1/i\hbar)\overline{H}_k$, $k = 1, 2, \cdots, m$. 则式(6) 可改写为

$$\mathring{X}(t) = \widetilde{A}X(t) + \sum_{k=1}^{m}\widetilde{B}_k X(t)u_k(t), \qquad (7)$$

其中 $\widetilde{A}$ 和 $\widetilde{B}_k(k = 1, 2, \cdots, m)$ 为斜厄米矩阵, 即 $\widetilde{A}^+ = -\widetilde{A}, \widetilde{B}_k^+ = -\widetilde{B}_k$.

进行如下变换:

$$\widetilde{A} := D_A + A, \widetilde{B}_k := D_{Bk} + B_k.$$

其中

$$D_A := \operatorname{diag}\left(\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\widetilde{A}), \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\widetilde{A})\right),$$

$$D_{Bk} := \operatorname{diag}\left(\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\widetilde{B}_k), \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\widetilde{B}_k)\right),$$

$$k = 1, 2, \cdots, m.$$

矩阵 D_A 和 D_{Bk} 对式(7) 的解给出了纯相位, 而这些项对态矢的相关相位不作贡献. 既然这些项仅在相位上不同, 对其物理量不产生影响, 所以可以忽略. 于是, 所研究的系统形式变为

$$\mathring{X}(t) = AX(t) + \sum_{k=1}^{m}B_k X(t)u_k(t). \qquad (8)$$

这就是量子力学系统的状态空间模型. 它是通过将原系统的状态(态矢波函数 $|\psi(t)\rangle$) 转化为几何空间的状态(演化矩阵 $X(t)$), 将一个抽象的物理概念变成一个实在的易于数学操作和控制处理的几何空间的状态, 为以后的控制分析与设计作好了准备.

3　量子系综状态模型的建立

从第 2 节的推导中可以看出, 量子力学系统的(纯) 状态可用归一化的波函数 $|\psi\rangle$ 来表示, 它是希尔伯特空间 H 中的一个单位矢量. 实际上, 除了用波函数 $|\psi\rangle$ 表示外, 量子力学系统的状态还可用在希尔伯特空间 H 上的密度算符矩阵 ρ 来表示. 如果系统处于纯态 $|\psi\rangle$, ρ 则是简单的状态投影, 即 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. 密度算符公式允许处理更为一般的系统状态, 如量子状态的系综(ensemble).

考虑一个由大量相同且非相互作用的粒子组成的量子系统, 它们分别处于不同的内部量子状态, 即系统处于状态 $|\psi_1\rangle$ 的分量为 ω_1, 处于状态 $|\psi_2\rangle$ 的分量为 ω_2, ⋯. 系统的状态作为一个整体, 由一个具有非负权值 ω_n 且总和为 1 的离散的量子态 $|\psi_n\rangle$ 的系综来描述. 这样一个量子态的系综称为混合态. 混合态是不能用波函数表达的, 它可用纯态的希尔伯特空间 H 中具有谱表达式的密度算符 ρ 来描述, 即

$$\rho = \sum_{n=1}^{N}\omega_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|, \qquad (9)$$

其中 $0 \le \omega_n \le 1, \sum_{n=1}^{N}\omega_n = 1$.

系统的状态必须是正交的, 一般有 $N \le \dim H$. 可以假定 $N = \dim H$, 因为可通过增加概率 $\omega_n = 0$ 的方式, 将线性独立的量子态子集扩大为希尔伯特空间 H 上的一个基. 在此仅考虑具有有限维离散能级的量子系统. 假定所选择的本征态 $|n\rangle$ 在 H 上形成完全正交集, 因此可用相应的本征态 $|n\rangle$ 来描述密度算符

$$\rho = \sum_{n=1}^{N}\rho_{nn}|n\rangle\langle n| + \sum_{n=1}^{N}\sum_{m>n}\rho_{nm}|n\rangle\langle m| + \rho_{nm}^{*}|m\rangle\langle n|. \qquad (10)$$

其中: ρ_{nn} 为对角矩阵, 代表能量本征态 $|n\rangle$ 的群; $\rho_{nm}(n \ne m)$ 为非对角矩阵, 用于确定本征态之间的相干态. 后者从能量本征态 $\rho = \sum_{n=1}^{N}\omega_n|n\rangle\langle n|$ 的统计系综中分辨出能量本征态的相干迭加态 $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N}c_n|n\rangle$.

系统的密度矩阵 ρ 满足量子 Liouville 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho = [H, \rho] = H\rho - \rho H, \qquad (11)$$

其中 H 为系统总的哈密顿. 如果系统受外部控制, 则 H 取决于一个有限数量的控制函数 $f_m(t)$ $(m = 1, 2, \cdots, M)$, 它是定义在时间间隔 $[t_0, t_F]$ 上的有界可测量的实函数, 并且根据具体问题可能还有其他限制. 如果与场的相互作用足够小, 则系统的哈密顿 H 可分解为

$$H = H_0 + \sum_{m=1}^{M}f_m(t)H_m. \qquad (12)$$

其中: H_0 为系统内部的哈密顿, H_m 为与场 f_m 相互作用的哈密顿.

密度矩阵 ρ 的演化满足

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^*(t, t_0), \qquad (13)$$

演化算符 $U(t, t_0)$ 满足薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = HU(t, t_0). \qquad (14)$$

将式(12) 代入(14), 可得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = H_0U(t, t_0) + \sum_{m=1}^{M}f_m(t)H_mU(t, t_0). \qquad (15)$$

令[5]

$$x(t) = U(t, t_0), X_0(x(t)) = H_0x(t),$$

$$X_m(x(t)) = -\frac{i}{\hbar}H_mU(t, t_0), m = 0, 1, \cdots, M.$$

则方程(15) 变为

$$\frac{dx}{dt} = X_0(x(t)) + \sum_{m=1}^{M} f_m(t) X_m(x(t)). \quad (16)$$

以此方式可将量子系综密度算符的演化方程转换成对演化算符的操纵问题

4　量子力学控制的几个基本问题

本文利用波函数对量子力学系统的纯态建立了演化模型, 并用密度矩阵对量子力学系统的混合态建立了演化模型 在所建模型的基础上, 可重新叙述量子系统控制的 5 个主要目标如下:

1) 某一纯态的初始化: 令 ρ 为 H 上的一个任意密度矩阵, 且 $|\psi\rangle \in H$, 它是将要制备的状态矢量 于是初始化包括所引起的迁移 $\rho \rightarrow |\psi\rangle\langle\psi|$

2) 可控性分析: 所要设计的演化矩阵 X 在 n 维幺正矩阵的李群 $U(n)$ (或 $SU(n)$) 上变化 探索这些控制问题的数学工具较多, 其中包括代数、群理论以及拓扑方法 可借助于李群理论对经典系统可控性问题的基本结果, 解决量子系统的可控性问题

3) 幺正控制: 即驱动一个给定的初态到达事先确定的终态(目标态). 目标为设计一个幺正演化矩阵 X, 使得态矢 $|\psi\rangle$ 转变成 $X|\psi\rangle$, 或将密度矩阵 ρ 转变成 $X\rho X^+$.

4) 最优化控制: 可观测值可用 H 上的厄米算符 A 来描述, 它的期望值(系综的平均值) 为 $\langle A(t)\rangle = \mathrm{Tr}(A\rho(t))$. 最优控制的目标就是寻找一种控制, 在某个目标时刻 t_F, 控制系统特别的量子状态群、量子状态的子空间或系统的能量等, 达到可观测的期望值的最大值

5) 量子状态的非破坏性测量: 令 $(P_i)_{i\in I}$ 是投影的一个完全正交(或可观测的) 群, H_c 是希尔伯特空间, 其上作用于作为测量仪器的任意系统 可观测的 P_i 的测量是一个幺正演化, 起始于直积态 $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle \in H_c \otimes H$, 终止于状态 $\sum_i |\phi_i\rangle \otimes P_i|\psi\rangle$. 其中 $(|\phi_i\rangle)_{i\in I}$ 为测量仪器状态的正交归一化群

参考文献(References):

[1] Dahleh M, Peirce A, Rabitz H A, et al. Control of molecular motion[J]. Proc IEEE, 1996, 84(1): 7-15.

[2] DiVincenzo D P. Quantum computation[J]. Science, 1995, 270(5234): 255-261.

[3] Salapaka M D, Rabitz H M, Ramakrishna V, et al. Controllability of molecular systems[J]. Physical Review A, 1995, 51: 1050-2947.

[4] Domenico D'alessandro, Mohammed Dahleh. Optimal control of two-level quantum systems[J]. IEEE Trans on Automatic Control, 2001, 46(6): 866-876.

[5] Schirmer S G, Leahy J V. Limits of control for quantum systems: Kinematial bounds on the optimization of observables and the question of dynamical realizability [H]. Physical Review A, 2001, 63(025403).

(上接第 1104 页)

参考文献(References):

[1] Billings S A, Tsang K M. Spectral analysis for nonlinear systems — Part I: Parametric nonlinear spectral analysis[J]. Mechanical Systems and Signal Processing, 1989, 3(4): 319-339.

[2] Zhu Z, Leung H. Adaptive identification of nonlinear systems with application to chaotic communications[J]. IEEE Trans on Circuits and Systems — I: Fundamental Theory and Applications, 2000, 47(7): 1072-1080.

[3] 焦李成. 非线性系统故障诊断的伏尔泰拉泛函理论[J]. 西安交通大学学报, 1988, 22(3): 79-85.
(Jiao Licheng. The Volterra theory for the fault diagnosis of nonlinear system[J]. J of Xi'an Jiaotong University, 1988, 22(3): 79-85.)

[4] 唐晓泉. 非线性系统频谱分析理论及其在故障诊断中的应用研究[D]. 西安: 西安交通大学, 1999.

[5] 魏瑞轩. 基于Volterra 级数模型的非线性系统辨识及故障诊断方法研究[D]. 西安: 西安交通大学, 2001.

[6] Schetzen M. The Volterra and Wiener Theories of Nonlinear Systems[M]. New York: Wiley, 1980.

[7] 魏瑞轩, 韩崇昭. 基于Volterra 级数模型的非线性系统的鲁棒自适应辨识[J]. 西安交通大学学报, 2001, 35(10): 1024-1028.
(Wei Ruixuan, Han Chongzhao. Robust adaptive identification for nonlinear system based on Volterra series model[J]. J of Xi'an Jiaotong University, 2001, 35(10): 1024-1028.)

[8] 张育林, 李东旭. 动态系统故障诊断理论与应用[M]. 长沙: 国防科技大学出版社, 1997.