

© 2005 г. М. С. АНАНЬЕВСКИЙ,  
(Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург),  
А. Л. ФРАДКОВ, д-р техн. наук  
(Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург)

## УПРАВЛЕНИЕ НАБЛЮДАЕМЫМИ В КОНЕЧНОУРОВНЕВЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМАХ<sup>1</sup>

Предложен новый подход к синтезу алгоритмов управления наблюдаемыми квантовомеханическими системами на основе метода скоростного градиента. Показано, что при выполнении условий типа невырожденности цель управления достигается, если начальное и целевое значение находятся в одном энергетическом слое. Показано, что погрешность достижения цели управления пропорциональна погрешности задания начального состояния системы и погрешности реализации управляющего воздействия. Представлены численные результаты для задачи управления предиссоциацией молекулы фторводорода (HF). Предложенные алгоритмы отличаются простотой построения.

### 1. Введение

Задачи управления процессами микромира, в том числе управления движением атомов и молекул, имеют богатую историю. Много работ посвящено и вопросам управления на основе моделей квантовой механики. Однако до последних лет возможности управления исследовались чисто теоретически [1–6]. Главными трудностями при управлении процессами на атомно-молекулярном уровне являются малые пространственные размеры управляемых объектов и большая скорость протекания процессов в них. Размеры молекул химических веществ (мономеров) имеют порядок нанометров ( $1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м}$ ), а характерные времена собственных колебаний атомов в молекуле имеют порядок фемтосекунд ( $1 \text{ фс} = 10^{-15} \text{ с}$ ). Создание приборов для измерения и управления в таких пространственно-временных масштабах представляет собой сложнейшую научно-техническую проблему. Технических возможностей для управления столь быстро протекающими процессами до последнего времени не существовало.

Положение изменилось в конце 1980-х гг. с появлением сверхбыстродействующих, фемтосекундных лазеров, генерирующих импульсы длительностью порядка десятков, а в настоящее время и единиц фемтосекунд, а также способов компьютерного управления формой лазерных импульсов. Возникло новое направление в химии – фемтохимия, за успехи в котором в 1999 г. была присуждена Нобелевская премия по химии А. Зивайлю [7]. С развитием других способов использования фемтосекундных лазеров возник термин “фемтосекундные технологии”, или “фемтотехнологии”.

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (02-01-00765), научной программы Президиума РАН № 19 (проект 1.4) и Конкурсного центра фундаментального естествознания (М04-2.1Д-185).

Фемтотехнологии используются, в частности, для решения задач селективной диссоциации, когда требуется разорвать определенные молекулярные связи, по возможности не влияя на остальные.

Предложено несколько подходов к управлению молекулярными системами. В подходе П. Брюмера и М. Шапиро [8] управление основано на интерференции двух лазерных пучков с различными частотами, амплитудами и фазами (схема накачки-гашения). Д. Таннор и С. Райс [9] предложили двухимпульсные схемы накачки-гашения во временной области. Для оптимизации импульсов впоследствии были использованы методы оптимального управления, в частности на основе метода В.Ф. Кротова [10]. Х. Рабиц с соавторами [11–14] исследовали различные варианты оптимального управления при классическом и квантовом описании динамики молекулярного движения. В [12] была выдвинута идея реализации адаптивного лазерного управления химическими реакциями с применением методов поисковой оптимизации (генетических алгоритмов), реализуемость которой впоследствии была подтверждена экспериментами [15–17].

Одна из простейших задач этого класса – задача о диссоциации двухатомной молекулы [18–21]. В то же время эта задача типична, на ней удобно сравнивать достоинства и недостатки различных методов. В [18] численно были исследованы возможности диссоциации молекулы фтористого водорода (HF) при воздействии периодически меняющегося поля (монохроматического лазерного излучения). Аналогичным методом в [19] была исследована диссоциация двухчастотным (бихроматическим) воздействием и показано, что интенсивность диссоциирующего поля может быть существенно снижена. В [20] получена оценка интенсивности диссоциирующего поля путем *чирпирования* – равномерного изменения частоты внешнего воздействия. Показана возможность дальнейшего снижения интенсивности поля, требуемой для диссоциации.

Новые возможности для управления молекулярными системами возникают при неперiodическом воздействии в виде обратной связи. Главные проблемы при этом – измерение состояния системы и реализация управляющего воздействия на промежутках времени, сравнимых с периодом собственных колебаний молекулы. В работах [13–14, 21] и других предложены различные алгоритмы управления с обратной связью, в том числе алгоритмы оптимального управления. Общей их особенностью является то, что они используются для синтеза управляющего воздействия как функции времени по заданной модели молекулярной системы. В вычислительных экспериментах можно считать, что все нужные сигналы измеряются, а синтезированный алгоритм реализуется в вычислительной машине. В результате будет сгенерирован управляющий сигнал как функция времени, а его реализация на объекте выполняется уже без измерений и без обратной связи. Практическому применению такого подхода мешает значительное число неопределенностей: неточно известно начальное состояние системы, построенная управляющая функция неточно вычисляется и реализуется с погрешностью. Наконец, сама модель молекулы неточна, поскольку неточно известны ее параметры, да и выбор между классическим и квантовым описанием часто вызывает дискуссии.

В последние годы интерес к задачам управления квантовыми системами стремительно возрастает. По данным журнала Сайенс Сайтэйшн Индекс (Science Citation Index), в начале XXI в. по этой тематике публиковалось более 500 статей в год в рецензируемых журналах. О современном состоянии проблемы можно судить по статьям, представленным в сборнике переводов [22], а также в сборнике [23]. Одним из важных приложений являются исследования по созданию квантовых компьютеров [24].

В настоящей работе описывается новый подход к решению класса задач управления квантовыми системами – задач управления наблюдаемыми, которые с математической точки зрения относятся к задачам частичного управления. Подход основан

на методе скоростного градиента [25], впервые применяемом ниже к задачам управления в комплексных пространствах. Рассмотрен случай систем, описываемых уравнениями Шредингера в конечномерном пространстве. Получены условия применимости предлагаемых алгоритмов. Эффективность подхода продемонстрирована на задаче о диссоциации двухатомной молекулы. Также в работе показано, что работоспособность алгоритма сохраняется при малых отклонениях в задании начального состояния системы и при погрешностях реализации управляющего воздействия.

Получаемые алгоритмы отличаются робастностью, поскольку не зависят от формы потенциала межмолекулярного взаимодействия. Они позволяют достигать диссоциации при меньшей интенсивности управляющего поля по сравнению с chirпированием и более просты для синтеза и расчета по сравнению с методами оптимального управления.

## 2. Постановка задачи и синтез алгоритма управления

Пусть динамика объекта управления описывается конечномерным уравнением Шредингера с управлением [22]:

$$(1) \quad i\hbar\dot{\Psi}(t) = \left[ H_0 + \sum_{k=1}^r u_k H_k \right] \Psi(t), \quad \Psi(t) \in \mathbb{C}^n.$$

Здесь  $i = \sqrt{-1}$  – мнимая единица,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $u_k$  – вещественнозначные скалярные функции управления,  $H_k$  – соответствующие им слагаемые в полном гамильтониане системы. Операторы  $H_k$  для  $k = 0, \dots, r$  предполагаются самосопряженными. Фазовым пространством этой системы является единичная сфера  $n$ -мерного комплексного пространства  $\mathbb{C}^n$ . Ставится следующая цель управления (ЦУ): требуется построить такие функции  $u_k(\Psi)$ , которые обеспечивают стремление заданной наблюдаемой  $Z$  к своему целевому значению  $Z_g$

$$(2) \quad (\text{ЦУ}) \quad \forall \Psi(t_0) : \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \Psi(t)^* Z \Psi(t) = Z_g,$$

где “\*” означает транспонирование и комплексное сопряжение. Обычно термин “наблюдаемая  $Z$ ” обозначает оператор в пространстве состояний, соответствующий некоторой характеристике системы (например, энергии). В результате тех или иных измерений, как правило, удается получить только конкретное числовое значение наблюдаемой. Это случайная величина, а  $\Psi(t)^* Z \Psi(t)$  имеет смысл ее среднего значения в момент времени  $t$ .

Для синтеза алгоритма управления воспользуемся методом скоростного градиента в конечной форме [25]. С этой целью введем целевую функцию

$$(3) \quad V(\Psi) = (\Psi^* Z \Psi - Z_g)^2.$$

Согласно методу скоростного градиента алгоритм управления вычисляется по формуле

$$(4) \quad u(\Psi) = -\gamma \nabla_u \dot{V}(\Psi).$$

Здесь  $\gamma > 0$  – коэффициент усиления,  $\nabla_u$  означает взятие градиента по вектору  $u = (u_1, \dots, u_r)$ , а точка – производную по времени в силу системы (1). Такой выбор функции управления гарантирует невозрастание целевой функции вдоль траекторий системы [25]. Поскольку стремление целевой функции к нулю эквивалентно выполнению цели управления (2), при некоторых дополнительных условиях, такой алгоритм может обеспечить выполнение цели.

Из (1), (3), (4) вытекает

$$\begin{aligned} u_k(\Psi) &= -\gamma \nabla_{u_k} \left\{ 2(\Psi^* Z \Psi - Z_g)(\dot{\Psi}^* Z \Psi + \Psi^* Z \dot{\Psi}) \right\} = \\ &= -\gamma \nabla_{u_k} \left\{ \frac{2i}{\hbar} (\Psi^* Z \Psi - Z_g) \Psi^* \left[ H_0 Z - Z H_0 + \sum_{k=1}^r u_k (H_k Z - Z H_k) \right] \Psi \right\}. \end{aligned}$$

Отсюда получается следующий алгоритм управления ( $k = 1, \dots, r$ )

$$(5) \quad u_k(\Psi) = -\gamma \frac{2i}{\hbar} (\Psi^* Z \Psi - Z_g) (\Psi^* [H_0 Z - Z H_0 + (H_k Z - Z H_k)] \Psi).$$

Таким образом, алгоритм управления наблюдаемыми (5) по обратной связи получен путем применения метода скоростного градиента к квантовомеханической модели. Отметим, что предложенный алгоритм (5) может использоваться и для управления бесконечномерными системами.

### 3. Исследование алгоритма управления

Основной результат работы содержится в следующем утверждении.

*Теорема 1. Пусть оператор  $Z$  коммутирует с оператором  $H_0$  и пусть операторы  $H_k$ ,  $k = 0, \dots, r$ , удовлетворяют следующим условиям:*

A1.  $z_k - z_m \neq 0$ ,  $k \neq m$ ,  $k, m = \overline{1, n}$ , где  $z_k$  – упорядоченные по возрастанию собственные числа наблюдаемой  $Z$ ;

A2. пусть  $\lambda_k$ ,  $k = \overline{1, n}$ , – упорядоченные по возрастанию собственные числа  $H_0$ , тогда  $(\lambda_k - \lambda_m) \neq (\lambda_r - \lambda_s)$ ,  $(k, m) \neq (r, s)$ ,  $k, m, r, s = \overline{1, n}$ ;

A3. для любой пары  $(k, m)$  существует такой номер  $l \in \{1, \dots, r\}$ , что  $h_k H_l h_m \neq 0$ , где через  $h_k$ ,  $k = \overline{1, n}$ , обозначены собственные вектора  $H_0$  единичной длины.

Тогда для любого начального условия  $\Psi_0$ , такого что  $z_k < \Psi_0^* Z \Psi_0 < z_{k+1}$ , где  $z_k < Z_g < z_{k+1}$ , алгоритм управления (5) решает задачу управления (2) наблюдаемой  $Z$  системы (1).

*Замечание 1.* Справедливость теоремы и ее доказательство не изменятся, если в качестве алгоритма управления использовать  $u = -F(\nabla_u \dot{V}(t))$ , где функция  $F(x)$  – непрерывна,  $F(x) = 0 \iff x = 0$ ,  $F(x)x > 0$ .

*Замечание 2.* Поскольку управление непрерывно, а фазовое пространство компактно, то путем выбора достаточно малого коэффициента усиления  $\gamma$  достижение цели управления возможно с помощью сколь угодно малого управляющего воздействия.

*Замечание 3.* Несмотря на то что достижение цели управления для произвольных начальных данных не доказано, при численном моделировании в рассматриваемых моделях всякий раз наблюдалось стремление наблюдаемой к целевому значению, разумеется, за исключением случая, когда в качестве начальных данных выступали чистые состояния системы.

*Замечание 4.* Условие A1 означает, что различным чистым состояниям соответствуют различные значения наблюдаемой  $Z$ . Условие A2 означает, что для разных пар чистых состояний частоты перехода между ними тоже различны. Условие A3 означает, что для любых двух чистых состояний существует ненулевая вероятность перехода между ними при любом (ненулевом) управлении. Таким образом, условия, налагаемые в теореме, не являются очень ограничительными для задач управления наблюдаемыми молекул. Например, для рассматриваемой в разделе 6 модели молекулы фторводорода (HF) они выполнены.

Согласно схеме изложенной во введении, для постановки эксперимента используется управление в виде функции времени, рассчитанной с помощью компьютерного моделирования математической модели квантовой системы. Исследуем поведение синтезированной системы при наличии погрешности в задании начального распределения и погрешности реализации управляющего воздействия.

Предположим, что начальное условие известно не точно, а приближенно: в начальный момент времени  $t_0$  начальное распределение  $\Psi_0 = \Psi_* + \delta\Psi$ , где  $\Psi_0$  – действительное начальное условие,  $\Psi_*$  – расчетное начальное условие,  $\delta\Psi$  – невязка между действительным и предполагаемым начальными условиями. Также предположим, что управление реализовано с ошибкой:  $u(t) = u_*(t) + \delta u(t)$ . Здесь  $u(t)$  – реализованное управление,  $u_*(t)$  – расчетное управление, а  $\delta u(t)$  – невязка между реализованным и рассчитанным управлениями. Пусть  $\Psi(t, \Psi_0, u(t))$  обозначает решение уравнения (1) с начальным условием  $\Psi_0$  и управлением  $u(t)$ . Следующее утверждение позволяет оценить погрешность достижения цели управления при заданных невязках.

*Теорема 2. Для любого времени  $t$ , при погрешностях в задании начального распределения и неточностях в реализации управляющего воздействия, имеет место следующая оценка отклонения наблюдаемой от рассчитанного значения*

$$(6) \quad |\Psi(t, \Psi_0, u(t))^* Z \Psi(t, \Psi_0, u(t)) - \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))^* Z \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))| \leq \\ \leq (2|\delta\Psi| + |\delta\Psi|^2 + 2\Delta(t) + \Delta^2(t)) \|Z\|,$$

$$(7) \quad \Delta(t) = \frac{1}{\hbar} \sum_{k=1}^r \|H_k\| \int_0^t |\delta u_k(t)| dt,$$

где под  $|\cdot|$  понимается эрмитова норма вектора в комплексном пространстве, а под  $\|\cdot\|$  соответствующая операторная норма.

*Замечание 5.* Если  $\int_0^{+\infty} |\delta u(t)| dt < +\infty$ , то можно в формуле (6) заменить  $\Delta(t)$

$$\text{на } \Delta = \frac{1}{\hbar} \sum_{k=1}^r \|H_k\| \int_0^{+\infty} |\delta u_k(t)| dt.$$

Теорема непосредственно вытекает из следующих двух утверждений, доказательство которых приведено в Приложении.

*Лемма 1.* Пусть  $\delta u(t) \equiv 0$ , т.е. управление реализовано без погрешностей. Тогда для любого  $t$  имеет место следующая оценка отклонения реализованного значения наблюдаемой от рассчитанного значения

$$(8) \quad |\Psi(t, \Psi_0, u(t))^* Z \Psi(t, \Psi_0, u(t)) - \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))^* Z \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))| \leq 2\|Z\| |\delta\Psi|.$$

*Лемма 2.* Пусть  $\delta\Psi \equiv 0$ , т.е. начальное распределение известно точно. Тогда для любого  $t$  имеет место следующая оценка отклонения наблюдаемой от рассчитанного значения

$$(9) \quad |\Psi(t, \Psi_0, u(t))^* Z \Psi(t, \Psi_0, u(t)) - \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))^* Z \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))| \leq \\ \leq (2\Delta(t) + \Delta^2(t)) \|Z\|,$$

где  $\Delta(t)$  определяется выражением (7).

#### 4. Численное моделирование управляемых квантовомеханических систем

Этап численного моделирования управляемых квантовых систем имеет важное значение. Согласно схеме постановки эксперимента, рассмотренной во введении, именно на этапе численного эксперимента рассчитывается функция управления.

В случае, если исходный квантовомеханический объект имеет конечномерное описание, для моделирования используются хорошо разработанные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Для бесконечномерных квантовых систем используются сеточные методы или метод Галеркина. В данной работе применяется метод Галеркина, так как он представляется более выгодным с точки зрения объемов вычислений. Этот метод позволяет выполнить основную массу вычислений всего один раз – при расчете параметров конечномерной системы, аппроксимирующей данную. Важно, что эта аппроксимация может использоваться для разных управляющих воздействий. Таким образом и осуществляется экономия вычислений.

Рассматривается математическая модель квантовой системы, динамика которой описывается управляемым уравнением Шредингера (1). Конечномерная аппроксимация берется по собственным векторам полного гамильтониана невозмущенной квантовой системы ( $H_0$ ). Обозначим через  $h_1, \dots, h_n$  набор из  $n$  ортонормированных собственных векторов оператора  $H_0$ , а через  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  – соответствующие им собственные числа. Тогда аппроксимирующая система имеет вид

$$(10) \quad i\hbar \frac{d\hat{\Psi}(t)}{dt} = \hat{H}_0 \hat{\Psi}(t) + \sum_{k=1}^r u_k \hat{H}_k \hat{\Psi}(t), \quad \hat{\Psi}(t) \in \mathbb{C}^n,$$

где  $H_k$ ,  $k = 0, \dots, r$ , – линейные самосопряженные операторы из  $\mathbb{C}^n$  в  $\mathbb{C}^n$ , определяемые соотношениями:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \hat{h}_k &= \lambda_k \hat{h}_k, \quad \forall k \in \{1, \dots, r\}, \\ \hat{h}_p^* \hat{H}_k \hat{h}_q &= h_p^* H_k h_q, \quad \forall p, q \in \{1, \dots, n\}, \forall k \in \{1, \dots, r\}. \end{aligned}$$

Здесь  $\hat{h}_k$ ,  $k = 1, \dots, n$ , – собственные векторы оператора  $\hat{H}_0$ . Считается, что при надлежащем выборе собственных векторов  $h_k$  динамика коэффициентов населенности чистых состояний при идентичных начальных данных примерно одинакова у рассматриваемых систем (1) и (10):  $h_k^* \Psi(t) \approx \hat{h}_k^* \hat{\Psi}(t)$ ,  $k = 1, \dots, n$ .

Описанная схема конкретизирована ниже для модели двухатомной молекулы.

## 5. Конечноуровневая аппроксимация квантовомеханической модели молекулы HF

Используется математическая модель двухатомной квантовомеханической молекулы, описываемой управляемым уравнением Шредингера с потенциалом Морзе  $V(r)$ :

$$(11) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = H_0 \Psi(r, t) + u H_1 \Psi(r, t),$$

где

$$\begin{aligned} H_0 &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) \right], \quad H_1 = A\mu(r), \\ V(r) &= D \left( \exp\left(-2\alpha \frac{r-r_0}{r_0}\right) - 2 \exp\left(-\alpha \frac{r-r_0}{r_0}\right) \right), \end{aligned}$$

где  $i = \sqrt{-1}$  – мнимая единица;  $\hbar$  – постоянная Планка;  $\Psi(r, t)$  – волновая функция;  $r \in (0, +\infty)$  – расстояние между атомами молекулы;  $M$  – масса молекулы, а в случае использования атомных единиц Хартри  $M$  – приведенная масса молекулы;  $V(r)$  – потенциал Морзе;  $u$  – управляющая функция напряженности внешнего

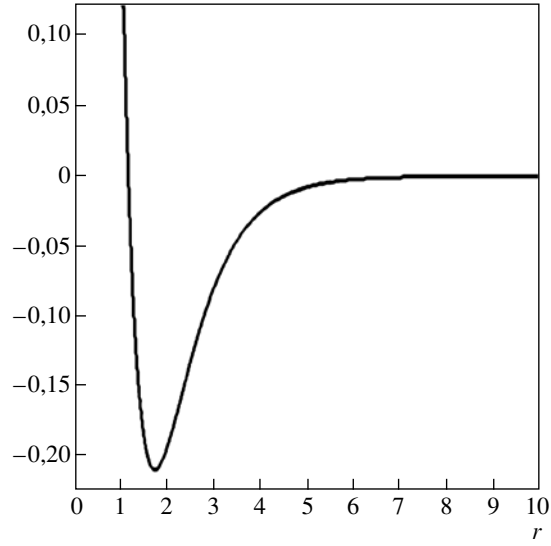


Рис. 1. График потенциала Морзе  $V(r)$  для молекулы фторводорода. Используются атомные единицы измерения Хартри.

электromагнитного поля;  $\mu(r)$  – молекулярный дипольный момент;  $D$ ,  $\alpha$ ,  $r_0$  – параметры потенциала Морзе. Согласно [18–19, 22] молекулярный дипольный момент в первом приближении можно положить равным  $\mu(r) = Ar$ . В атомных единицах Хартри параметры для молекулы HF имеют следующие значения [18, 19]:  $D = 0,2101$ ,  $\alpha = 2,1350$ ,  $r_0 = 1,75$ ,  $M = 1732$ ,  $A = 0,4541$ ,  $\hbar = 1$ .

Потенциал Морзе используется при описании колебаний двухатомных молекул. Считается, что он является более физичным, чем потенциал Кратцера [27]. Он имеет глобальный минимум в точке равновесия системы  $r = r_0 = 1,75$ , равный  $-D = -0,2101$ . При сильном сближении ядер  $V(r)$  принимает положительные значения, затем становится отрицательным вследствие интенсивного притяжения Гайтлера – Лондона, и, наконец, постепенно возрастает, описывая более слабые силы Ван-дер-Ваальса (рис. 1).

Собственные функции и соответствующие им собственные числа оператора  $H_0$  с высокой степенью точности могут быть получены аналитически. С подробным выводом, который основан на сведении к вырожденному гипергеометрическому уравнению, можно ознакомиться в [27]. Все собственные числа  $\lambda_k$ , отвечающие связанным состояниям ( $\lambda_k < 0$ ), задаются следующими уравнениями

$$\lambda_k = -D + \frac{1}{2Mr_0^2} \left( 2\alpha\sqrt{2MDr_0^2} \left( k + \frac{1}{2} \right) - \alpha^2 \left( k + \frac{1}{2} \right)^2 \right),$$

$$0 \leq k < \frac{\sqrt{2MDr_0^2}}{\alpha} - \frac{1}{2}.$$

Соответствующие им собственные функции имеют вид

$$h_k(r) = B_k y^{-\frac{m_k}{2}} e^{\frac{1}{2}y} \frac{d^k}{dy^k} (y^{m_k+k} e^{-y}),$$

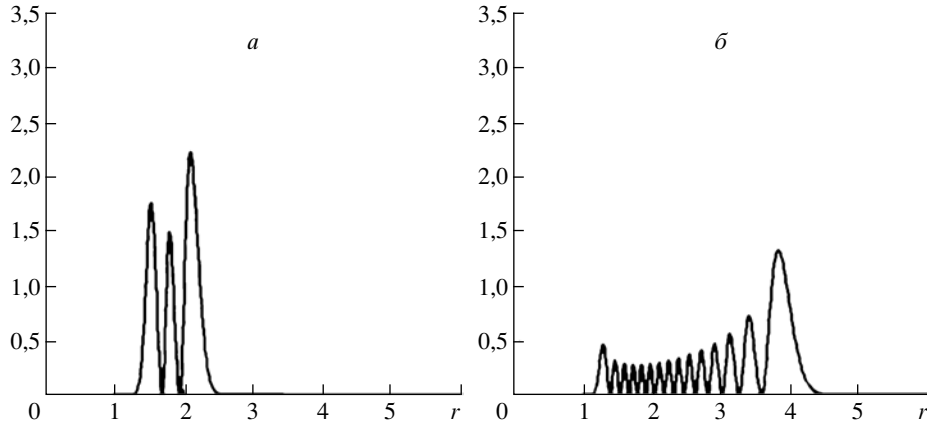


Рис. 2. Собственные функции, соответствующие а) 2-му и б) 14-му собственным числам. Используются атомные единицы измерения Хартри.

где

$$y = \frac{2\sqrt{2MDr_0^2}}{\alpha} \exp\left(-\alpha \frac{r-r_0}{r_0}\right), \quad m_k = 2\sqrt{\frac{-2M\lambda_k r_0^2}{\alpha}},$$

а  $B_k$  – нормирующий множитель. Коэффициенты  $B_k$  вычисляются с помощью процедуры пакета MATLAB с точностью до шестого знака методом адаптивных квадратур Лобатто [28]. На рис. 2 приведены примеры собственных функций, соответствующих 2-му и 14-му собственным числам (всего их 22).

Рассматривается конечноуровневая аппроксимация по всем собственным функциям, соответствующим связанным состояниям молекулы

$$(12) \quad i \frac{d\widehat{\Psi}(t)}{dt} = \widehat{H}_0 \widehat{\Psi}(t) + u \widehat{H}_1 \widehat{\Psi}(t), \quad \widehat{\Psi}(t) \in \mathbb{C}^{22},$$

где  $\widehat{h}_k$ ,  $k = 0, \dots, 21$ , – ортонормированные собственные векторы оператора  $\widehat{H}_0$ , удовлетворяющие соотношениям

$$\begin{aligned} \widehat{h}_k^* \widehat{H}_0 \widehat{h}_k &= \lambda_k, \quad k = 0, \dots, 21, \\ \widehat{h}_p^* \widehat{H}_1 \widehat{h}_q &= A \int_0^{+\infty} r h_p^*(r) h_q(r) dr, \quad q, p = 0, \dots, 21. \end{aligned}$$

Расчет матрицы  $H_1$  выполняется численно и требует значительных вычислительных ресурсов время (для рассмотренного примера двухатомной молекулы при учете 23 энергетических уровней занимает 5 ч на машине pentium 4).

## 6. Задача преддиссоциации молекулы HF

Рассматривается задача преддиссоциации (выведения молекулы на заданный энергетический уровень) молекулы HF.

Предполагается, что начальное состояние равномерно распределено между 2-м и 3-м энергетическими уровнями, что соответствует сильно связанному состоянию



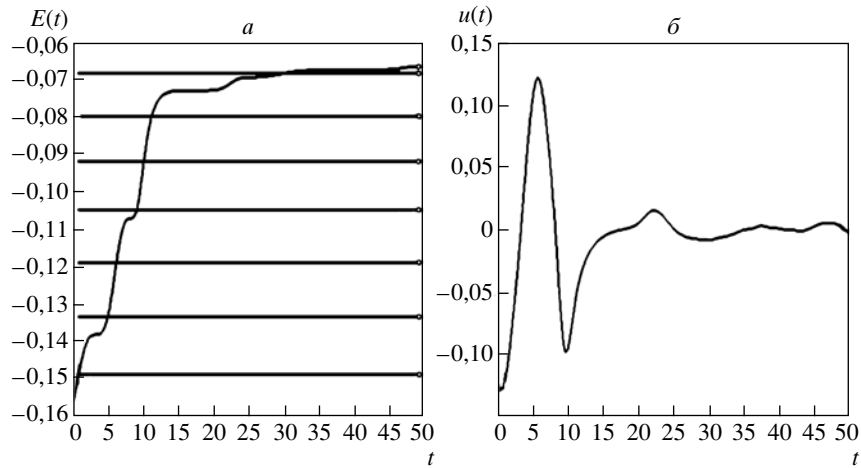


Рис. 3. а) энергия квантовой системы, б) функция управления  $u(t)$ . Используются атомные единицы измерения Хартри. Шкала времени дана в фемтосекундах.

молекулы. Наблюдаемая энергии задается оператором  $\hat{H}_0$ . Начальная энергия молекулы равняется  $-0,1571$ . Целевое значение устанавливается в  $-0,06$ , которое находится между энергиями 10-го и 11-го энергетических уровней, что соответствует состоянию преддиссоциации молекулы. Требуется построить функцию управления  $u(t)$ , стабилизирующую энергию молекулы на целевом значении. Согласно схеме, описанной в разделе 2, алгоритм управления имеет вид

$$(13) \quad u_k(\Psi) = -\gamma \frac{2i}{\hbar} (\Psi^* \hat{H}_0 \Psi + 0,06) \left( \Psi^* [\hat{H}_1 \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{H}_1] \Psi \right).$$

Из теоремы 1 следует, что если энергия начального состояния лежит между энергиями 10-го и 11-го энергетических уровней, то этот алгоритм выполняет цель управления. В рассматриваемом случае энергия начального состояния лежит между энергиями 2-го и 3-го энергетических уровней.

На рис. 3,б изображен импульс управления, рассчитанного по квантовомеханической модели, с коэффициентом усиления  $\gamma = 200$ . На рис. 3,а изображена эволюция энергии, горизонтальные линии соответствуют значениям энергий чистых состояний молекулы. Время моделирования составляло 50 фемтосекунд. Хорошо видно, что предложенный алгоритм может эффективно выполнять цель управления и для начальных данных, лежащих вне области, указанной в теореме.

## 7. Заключение

Работа посвящена разработке и исследованию алгоритмов управления наблюдаемыми для квантовомеханических систем. Предложен новый алгоритм управления наблюдаемыми, основанный на методе скоростного градиента и даны теоретические и экспериментальные оценки его эффективности. Показано, что цель управления достигается, если начальное и целевое значения находятся в одном энергетическом слое, и выполняются условия типа невырожденности: различным чистым состояниям соответствуют различные значения наблюдаемой энергии, для разных пар чистых состояний частоты перехода между ними также различны, и для любых двух

чистых состояний существует ненулевая вероятность перехода между ними при любом ненулевом управлении. Эффективность предложенного алгоритма за пределами этих предположений продемонстрирована с помощью численного моделирования для задачи о преддиссоциации (выведения на заданный энергетический уровень) молекулы фторводорода (HF). Полученные оценки чувствительности алгоритма показывают, что погрешность вычисления значения наблюдаемой пропорциональна погрешности в исходных данных и погрешности реализации управляющей функции.

В дальнейшем предполагается исследовать возможность распространения полученных результатов на задачи управления несколькими наблюдаемыми в многоатомных молекулах.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

*Доказательство теоремы 1.* Поскольку оператор эволюции замкнутой системы (1), (5) унитарен, а начальный вектор состояния принадлежит единичной сфере, то и вся траектория тоже принадлежит единичной сфере. Продолжимость решения на  $\mathbb{R}$  обуславливается ограниченностью на всем фазовом пространстве правой части уравнения (1).

Доказательство асимптотической устойчивости целевого значения энергии основано на использовании теоремы Ла-Салля [25]. В качестве функции Ляпунова рассматривается целевая функция  $V(\Psi)$ . Производная функции Ляпунова в силу системы неположительна

$$(П.1) \quad \dot{V}(\Psi) = \gamma \frac{4}{\hbar^2} (\Psi^* Z \Psi - Z_g)^2 \left( \sum_{k=1}^r \Psi^* [H_k Z - Z H_k]^2 \Psi \right) \leq 0.$$

Следовательно, по теореме Ла-Салля любое решение системы стремится к максимальному инвариантному, относительно системы с нулевым управлением, множеству, лежащему в  $K = \{\phi : \dot{V}(\phi) = 0\}$ .

Равенство нулю  $\dot{V}(\Psi)$  может быть только в двух случаях:

$$(П.2) \quad \Psi^* Z \Psi - Z_g = 0,$$

$$(П.3) \quad \sum_{k=1}^r \Psi^* [H_k Z - Z H_k]^2 \Psi = 0.$$

Обозначим через  $K_1$  подмножество фазового пространства, где выполнено первое равенство, а через  $K_2$  – подмножество, где выполнено второе ( $K = K_1 \cup K_2$ ).

Покажем, что множество  $K_1$  является инвариантным для системы (1) с нулевым управлением. Поскольку для любого вектора фазового пространства  $\Psi_1$  имеет место равенство (П.2) и для любого момента времени  $t_0$  функция

$$(П.4) \quad \Psi(t) = \exp(H_0(t - t_0)) \Psi_1$$

является решением замкнутой системы (1), (5), причем соответствующая траектория целиком принадлежит множеству  $K_1$ , то максимальным инвариантным подмножеством множества  $K$  будет объединение  $K_1$  и максимального инвариантного подмножества множества  $K_2$ .

Рассмотрим множество  $K_2$ . Поскольку принадлежность траектории множеству  $K_2$  влечет равенство нулю управления вдоль всей траектории, то решение системы (1), (5) здесь можно записать в явном виде

$$(П.5) \quad \Psi(t) = \sum_{k=1}^n c_k \exp(-i\lambda_k t) h_k, \quad \sum_{k=1}^n |c_k|^2 = 1.$$

После подстановки выражения (П.5) в равенство (П.3), задающее множество  $K_2$ , это равенство примет вид

$$(П.6) \quad \sum_{j=1}^r \sum_{k,m=1}^n \left( c_k^* c_m (z_k - z_m) e^{i(\lambda_k - \lambda_m)t} h_k^* H_j h_m \right) = 0.$$

Согласно условию А2 функции  $\exp(i(\lambda_k - \lambda_m)t)$  являются линейно независимыми. Следовательно, тождественное равенство нулю их линейной комбинации возможно только в том случае, когда все коэффициенты этой линейной комбинации равны нулю. Из условий А1, А2, А3 следует, что отличным от нуля может быть только один из коэффициентов  $c_k$ ,  $k = \overline{1, n}$ . Следовательно, максимальным инвариантом множества  $K_2$  является множество чистых состояний системы (ниже  $I(B)$  означает максимальное инвариантное подмножество множества  $B$ ):

$$(П.7) \quad I(K_2) = \{ \Psi : \Psi = e^{ic} h_k, \quad k = \overline{1, n}, \quad c \in \mathbb{R} \}.$$

Целевая функция монотонно убывает, а минимальное значение, которое она принимает на элементах множества  $I(K_2)$ , по условию теоремы отлично от нуля и равно

$$(П.8) \quad \min_{k=\overline{1, n}} (z_k - Z_g)^2.$$

Поэтому если начальное значение целевой функции меньше этого минимума, то целевая функция будет стремиться к нулю. Максимальный инвариант множества  $K$ , на котором целевая функция равна нулю, – множество  $K_1$ , а на нем наблюдаемая равна своему целевому значению  $Z_g$ . Теорема 1 доказана.

*Доказательство леммы 1.* С управлением в виде функции времени уравнение Шредингера (1) становится линейным:

$$(П.9) \quad i\hbar \dot{\Psi}(t) = \left[ H_0 + \sum_{k=1}^r u_k(t) H_k \right] \Psi(t), \quad \Psi(t) \in \mathbb{C}^n.$$

В силу линейности  $\Psi(t, \Psi_0, u_*(t)) = \Psi(t, \Psi_*, u_*(t)) + \Psi(t, \delta\Psi, u_*(t))$ . Следовательно,

$$\begin{aligned} & |\Psi(t, \Psi_0, u_*(t))^* Z \Psi(t, \Psi_0, u_*(t)) - \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))^* Z \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))| = \\ & = |(\Psi(t, \Psi_*, u_*(t)) + \Psi(t, \delta\Psi, u_*(t)))^* Z (\Psi(t, \Psi_*, u_*(t)) + \Psi(t, \delta\Psi, u_*(t))) - \\ & - \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))^* Z \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))| = \\ & = |\Psi(t, \delta\Psi, u_*(t))^* Z \Psi(t, \Psi_*, u_*(t)) + \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))^* Z \Psi(t, \delta\Psi, u_*(t)) + \\ & + \Psi(t, \delta\Psi, u_*(t))^* Z \Psi(t, \delta\Psi, u_*(t))| = \\ & = |\Psi(t, \delta\Psi, u_*(t))^* Z \Psi(t, \Psi_0, u_*(t)) + \Psi(t, \Psi_*, u_*(t))^* Z \Psi(t, \delta\Psi, u_*(t))| \leq \\ & \leq |\Psi(t, \delta\Psi, u_*(t))| \|Z\| |\Psi(t, \Psi_0, u_*(t))| + \\ & + |\Psi(t, \Psi_*, u_*(t))| \|Z\| |\Psi(t, \delta\Psi, u_*(t))| \leq 2\|Z\| |\delta\Psi|. \end{aligned}$$

Искомая оценка получена, лемма 1 доказана.

*Доказательство леммы 2.* Рассматриваются две системы:

$$(П.10) \quad i\hbar \dot{x}(t) = H_0 x(t) + \sum_{k=1}^r u_k(t) H_k x(t),$$

$$(П.11) \quad i\hbar \dot{y}(t) = H_0 y(t) + \sum_{k=1}^r [u_k(t) + \delta u_k(t)] H_k y(t).$$

Уравнение (П.10) соответствует системе без погрешностей, а уравнение (П.11) – системе с погрешностью в управлении  $\delta u(t)$ . Пусть  $z(t)$  обозначает расхождение решений этих систем во времени, при условии, что в начальный момент времени решения совпадали:  $z(t) = y(t) - x(t)$ ,  $z(t_0) = 0$ . Тогда:

$$(П.12) \quad i\hbar \dot{z}(t) = H_0 z(t) + \sum_{k=1}^r [u_k(t) + \delta u_k(t)] H_k z(t) + \sum_{k=1}^r \delta u_k(t) H_k x(t), \quad z(t_0) = 0.$$

Пусть  $\mathcal{Z}(t)$  обозначает фундаментальную матрицу решений однородной системы линейных уравнений с переменными коэффициентами, соответствующей системе (П.12). Подставив в (П.12)  $z(t) = \mathcal{Z}(t)f(t)$  получим, что вспомогательная функция  $f(t)$  удовлетворяет уравнению:

$$i\hbar \mathcal{Z}(t) \dot{f}(t) = \sum_{k=1}^r \delta u_k(t) H_k x(t), \quad f(t_0) = 0.$$

Следовательно,

$$z(t) = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{Z}(t) \int_{t_0}^t \mathcal{Z}^{-1}(t) \sum_{k=1}^r \delta u_k(t) H_k x(t) dt.$$

Учитывая, что  $\|\mathcal{Z}(t)\| = \|\mathcal{Z}^{-1}(t)\| = 1$  и  $\|x(t)\| = 1$ , заключаем:

$$(П.13) \quad \|z(t)\| \leq \frac{1}{\hbar} \sum_{k=1}^r \|H_k\| \int_{t_0}^t |\delta u_k(t)| dt.$$

Правая часть этого выражения и есть величина  $\Delta(t)$ , введенная в теореме 2.

Теперь оценим изменение наблюдаемой  $Z$  при известном изменении фазового вектора:

$$(П.14) \quad |(x + \delta x)^* Z(x + \delta x) - x^* Zx| \leq \\ \leq |\delta x^* Zx + x^* Z\delta x + \delta x^* Z\delta x| \leq (2|\delta x| + |\delta x|^2) \|Z\|.$$

Выражение (П.13) дает оценку на фазовый вектор системы при неточностях в управлении, а выражение (П.14) – оценку наблюдаемой при известной величине отклонения фазового вектора. Вместе они дают искомую оценку (9). Лемма 2 доказана.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бутковский А.Г., Самойленко Ю.И. Управление квантовыми объектами. I и II // *АиТ*. 1979. № 4. С. 5–25; № 5. С. 5–23.
2. Huang G.M., Tarn T.J., Clark J.W. // *Math. Modelling*. 1980. № 1. P. 109.
3. Белавкин В.П. К теории управления квантовыми наблюдаемыми системами // *АиТ*. 1983. № 2. С. 50–63.
4. Бутковский А.Г., Самойленко Ю.И. Управление квантово-механическими процессами. М.: Наука, 1984.
5. Искендеров А.Г., Ягубов Г.Я. Оптимальное управление нелинейными квантовомеханическими системами // *АиТ*. 1988. № 1. С. 27–38.
6. Завалишин Д.С., Ревенко В.В. Оптимизация кинетической энергии микрообъекта // *Изв. АН СССР. Сер. Техн. кибернетика*. 1988. № 3. С. 143–147.

7. *Zewail A.* Femtochemistry: Atomic-Scale dynamics of the chemical bond (Adapted from the Nobel Lecture) // *J. Phys. Chemistry. A.* 2000. 104. P. 5660–5694.
8. *Shapiro M., Brumer P.* Laser control of product quantum state populations in unimolecular reactions // *J. Chem. Phys.* 1986. V. 84. P. 4103–4110.
9. *Tannor D.J., Rice S.A.* Control of selectivity of chemical reaction via control of wave packet evolution // *J. Chem. Phys.* 1985. V. 83. P. 5013.
10. *Kosloff R., Rice S.A., Gaspard P. et al.* Wavepacket dancing: Achieving chemical selectivity by shaping light-pulses // *Chem. Phys.* 1989. V. 139 P. 201.
11. *Dahleh M., Pierce. A., Rabitz H., Ramakrishna V.* Control of molecular motion // *Proc. IEEE.* 1996. V. 84. № 1. P. 7–15.
12. *Judson R.S., Rabitz. H.* Teaching Lasers to Control Molecules // *Phys. Rev. Lett.* 1992. V. 68. P. 1500.
13. *Peirce A., Dahleh M., Rabitz H.* Optimal Control of Quantum Mechanical Systems: Existence, Numerical Approximations and Applications // *Phys. Rev. A.* 1988. V. 37. P. 4950.
14. *Rabitz H.* Algorithms for closed loop control of quantum dynamics // *Proc. 39th IEEE Conf. Decisions and Control.* Sydney, 2000. P. 937–942.
15. *Assion A., Baumert T., Bergt M. et al.* Control of chemical reactions by feedback-optimized phase-shaped femtosecond laser pulses // *Science.* 1998. V. 282. P. 919.
16. *Bardeen C.J., Yakovlev V.V., Wilson K.R. et al.* Feedback quantum control of molecular electronic population transfer // *Chem. Phys. Lett.* 1997. V. 280. P. 151.
17. *Пирсон Б.Дж., Уайт Дж.Л., Вейнахт Ч. и др.* Когерентное управление химическими реакциями / Управление молекулярными и квантовыми системами / Под ред. А.Л. Фрадкова, О.А. Якубовского. Москва-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика. 2003.
18. *Goggin M.E., Milonni P.W.* Driven Morse oscillator: Classical chaos, quantum theory and photodissociation // *Phys. Rev. A.* 1988. V. 37. № 3. P. 796.
19. *Goggin M.E., Milonni P.W.* Driven Morse oscillator: Classical chaos and quantum theory for two-frequency dissociation // *Phys. Rev. A.* 1988. V. 38. № 10. P. 5174.
20. *Liu W.K., Wu B., Yuan J.M.* Nonlinear dynamics of chirped pulse excitation and dissociation of diatomic molecules // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V. 75. № 7. P. 1292.
21. *Yu C., Gross P., Ramakrishna V. et al.* Control of classical regime molecular objectives – applications of tracking and variations of the theme // *Automatica.* 1997. № 9. P. 1617–1633.
22. Управление молекулярными и квантовыми системами / Под ред. А.Л. Фрадкова, О.А. Якубовского. Москва-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2003.
23. *Proc. Int. Conf. "Physics and Control" / Eds. A.L. Fradkov, A.N. Churilov. V. 3. Control of Microworld Processes. Nano- and Femtotechnologies. IEEE. SPb.: 2003.*
24. *Валиев К.А., Кожин А.А.* Квантовый компьютер: мечта или реальность? Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2000.
25. *Мирошник И.В., Никифоров В.О., Фрадков А.Л.* Нелинейное и адаптивное управление сложными динамическими системами. СПб.: Наука, 2000.
26. *Барбашин Е.А.* Введение в теорию устойчивости. М.: Наука, 1967.
27. *Flugge S.* Задачи по квантовой механике 1. М.: Мир, 1974.
28. *Gautschi W., Gander W.* Adaptive Quadrature – Revisited. *BIT.* V. 40. 2000. P. 84–101.

*Статья представлена к публикации членом редколлегии Б.Т. Поляком.*

Поступила в редакцию 12.07.2004