

PACS 02.30.Yy, 03.65.-w

© 2007 г. М.С. АНАНЬЕВСКИЙ
(Санкт-Петербургский государственный университет,
Институт проблем машиноведения РАН)

СЕЛЕКТИВНОЕ УПРАВЛЕНИЕ НАБЛЮДАЕМЫМИ В АНСАМБЛЕ КВАНТОМЕХАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ¹

Предложен новый подход к синтезу алгоритмов селективного управления наблюдаемыми квантовомеханическими системами при дополнительных ограничениях в течение всего периода управления. Получены аналитические результаты достижения цели управления при некоторых дополнительных предположениях. Показано, что погрешность достижения цели управления пропорциональна погрешности задания начального состояния системы и погрешности реализации управляющего воздействия. Представлены численные результаты для задачи селективного управления энергией молекул водорода (H_2) с разными изотопами. Предложенные алгоритмы отличаются простотой построения.

1. Введение

Первая монография по управлению квантовомеханическими процессами была опубликована в СССР в 1984 г. [1] и являлась чисто теоретическим исследованием нескольких интересных задач. Практическая реализация экспериментов по управлению молекулярной динамикой стала возможной с появлением в конце 1980-х сверхбыстродействующих фемтосекундных лазеров, генерирующих импульсы длительностью порядка десятков, а в настоящее время и единиц фемтосекунд ($1 \text{ фс} = 10^{-15} \text{ с}$), а также способов компьютерного управления формой лазерных импульсов. Поставленные эксперименты подтвердили возможность использования лазеров для изменения естественного хода химических реакций, управления ими [2, 3]. Быстрое развитие этой области (см. рис. 1) привело к появлению целого ряда новых задач, многие из которых лежат на стыке физической химии и теории управления [4–6].

Одной из типичных задач этого класса является задача об управлении диссоциацией двухатомной молекулы. В [7–9] были получены результаты, свидетельствующие о низкой вероятности диссоциации двухатомных молекул даже при использовании интенсивных монохроматических лазерных импульсов. Этот эффект объясняется ангармоничностью молекулярного потенциала и нелинейностью взаимодействия с управляющим лазерным полем. В то же время известно, что если интенсивность лазера превосходит $10^{13} \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$, то процесс ионизации будет доминировать над процессом диссоциации. В [10] было показано, что при использовании двухчастотного (бихроматического) воздействия интенсивность диссоциирующего поля может быть существенно снижена. Исследования по применению алгоритмов с чирпингом, т.е. равномерного изменения частоты, показали возможность дальнейшего снижения интенсивности поля, требуемой для диссоциации [11, 12]. В [13] на основе метода

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Нидерландского научного общества и Российского фонда фундаментальных исследований (совместный проект 047.011.2004.004), Российского фонда фундаментальных исследований (проект 00869) и программы Президиума РАН 22.

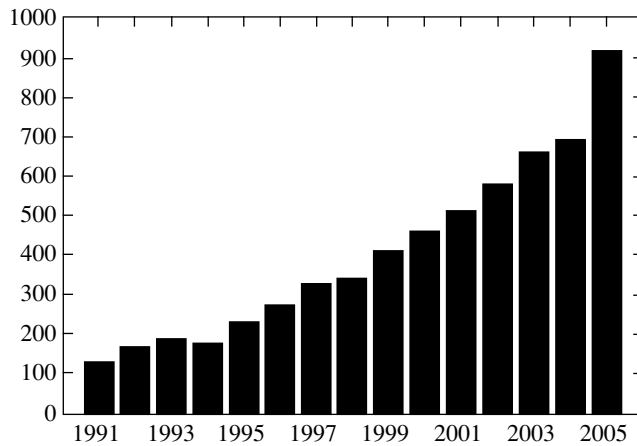


Рис. 1. Количество статей, опубликованных в рецензируемых журналах, посвященных вопросам управления в квантовых системах (по данным журнала Science Citation Index).

скоростного градиента был получен алгоритм, позволяющий рассчитывать форму диссоциирующего поля со сколь угодно малой амплитудой.

Размеры молекул химических веществ (мономеров) имеют порядок нанометров ($1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м}$), что на много порядков меньше ширины лазерного поля, поэтому избирательное воздействие невозможно, и управляющему импульсу подвергается одновременно большое число молекулярных систем. В связи с этим возникает задача селективного управления, т.е. синтеза управляющего импульса, переводящего молекулы одного типа в заданное состояние и не изменяющего существенно молекулы другого типа. В [15] были получены необходимые условия для одновременной управляемости нескольких конечномерных квантовомеханических систем. Однако эти теоремы существования не дают никакой подсказки к построению алгоритма управления и не позволяют исследовать свойство управляемости при дополнительных ограничениях, накладываемых на управляющий импульс.

Настоящая работа развивает полученные в [13, 14] результаты по управлению наблюдаемыми на случай нескольких независимых квантовомеханических систем. Подход основан на методе скоростного градиента [16], впервые применяемом ниже к задачам управления в комплексных пространствах с ограничениями. Сформулированы достаточные условия применимости предлагаемых алгоритмов. Показано, что достижение цели управления возможно при помощи сколь угодно малого по амплитуде управляющего импульса. Эффективность подхода продемонстрирована численным моделированием на примере задачи одновременного управления энергией нескольких двухатомных молекул водорода (H_2), состоящих из разных изотопов. Также в работе получены оценки достижения цели управления при малых отклонениях в задании начального состояния системы и при погрешностях в реализации управляющего воздействия.

2. Постановка задачи

Как уже отмечалось во введении, лазерное управление не является избирательным, управляющий импульс получают все молекулы, находящиеся в области облучения. Поэтому ставится задача о синтезе управляющего поля, обладающего свойством селективного воздействия, т.е. возбуждающего молекулы одного типа и по возможности не изменяющего существенно динамику остальных.

Рассматривается несколько независимых молекулярных систем, динамика которых описывается конечномерным управляемым уравнением Шредингера [15]:

$$(1) \quad i\hbar\dot{\phi}_n = H_n\phi_n + uS_n\phi_n, \quad n = 1, \dots, N, \quad \phi \in \mathbb{C}^\nu, \quad \|\phi\| = 1,$$

где $i = \sqrt{-1}$; \hbar – постоянная Планка²; N – число рассматриваемых систем (различных типов молекул, находящихся в зоне облучения), u – вещественнозначная функция управления, напряженность электрической составляющей лазерного поля; управляющее воздействие одинаково для всех систем. Для n -й системы $n = 1, \dots, N$: H_n – самосопряженный оператор полной энергии невозмущенной системы; S_n – самосопряженный оператор дипольного момента молекулы; ϕ_n – фазовый вектор системы.

Ставится следующая задача управления для известных начальных данных. Требуется найти функцию $u(t)$, обеспечивающую выполнение следующих условий:

$$(2) \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \phi_n^*(t)Z_n\phi_n(t) = g_n, \quad 1 \leq n \leq \mu,$$

$$(3) \quad \forall t \geq 0 : m_n < \phi_n^*(t)Z_n\phi_n(t) < M_n, \quad \mu + 1 \leq n \leq N.$$

Здесь “*” означает транспонирование и комплексное сопряжение, для $n = 1, \dots, N$: Z_n – самосопряженный оператор (наблюдаемая); g_n – желаемое среднее значение наблюдаемой Z_n ; m_n, M_n – допустимые границы динамики среднего значения Z_n .

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 $\phi(t)^*Z\phi(t)$ имеет смысл ее среднего значения в момент времени t .

Отметим, что выполнение ограничения (3) требуется в течение всего времени управления.

Типичным примером наблюдаемой для задачи управления является наблюдаемое значение энергии: $Z_n = H_n, n = 1, \dots, N$. В этом случае условие (2) означает, что для $n = 1, \dots, \mu$ желаемое среднее значение энергии молекулы n -го типа – g_n , а допустимые границы для энергий остальных – m_n, M_n . Если выбрать $g_n \gg 0$, а $M_n \ll 0$, то вероятность диссоциации молекул типа $1, \dots, \mu$ будет высокой, а $\mu + 1, \dots, N$ – низкой.

3. Синтез алгоритма управления

Согласно [13] предлагается предварительно построить алгоритм управления по обратной связи $u = u(\phi_1, \dots, \phi_N)$, а затем с известными начальными данными произвести компьютерное моделирование динамики системы и рассчитать временной профиль функции управления:

$$(4) \quad u = u(\phi_1, \dots, \phi_N) = u(\phi_1(t), \dots, \phi_N(t)) = u(t).$$

Отметим, что для задания начальных данных – распределения молекулярного ансамбля в состоянии равновесия (т.е. распределения Гиббса) – достаточно знать значение температуры.

² $\hbar = 5309 \text{ см}^{-1} \cdot \text{фс}$.

Синтез алгоритма управления основывается на методе скоростного градиента в конечной форме [16] со специфичной целевой функцией Q :

$$(5) \quad Q(\phi_1, \dots, \phi_N) = \sum_{n=1}^{\mu} a_n |\phi_n^* Z_n \phi_n - g_n|^{p_n} + \\ + \sum_{n=\mu+1}^N a_n |\phi_n^* Z_n \phi_n - m_n|^{-p_n} |\phi_n^* Z_n \phi_n - M_n|^{-p'_n}.$$

Здесь $a_n > 0$, $p_n, p'_n > 1$ – параметры алгоритма. Первая сумма – сумма степеней отклонений от целевого значения – обычный прием при использовании метода скоростного градиента. Вторая сумма с отрицательными степенями отклонений от допустимых границ в методе скоростного градиента используется впервые и введена исключительно для обеспечения выполнения условий (3).

Согласно методу скоростного градиента алгоритм управления вычисляется по формуле

$$(6) \quad u(\phi_1, \dots, \phi_N) = -\Gamma \nabla_u \dot{Q}(\phi_1, \dots, \phi_N).$$

Здесь $\Gamma > 0$ – коэффициент усиления, ∇_u означает взятие градиента по u , а точка – производную по времени в силу систем (1). Такой выбор управления гарантирует невозрастание целевой функции вдоль траекторий системы, а так как на границе области, задаваемой ограничениями (3), функция $Q(\phi_1, \dots, \phi_N) = +\infty$, то эта граница никогда не пересекается. Поскольку стремление целевой функции к нулю эквивалентно выполнению цели управления (2), то при некоторых дополнительных условиях предложенный алгоритм может обеспечить выполнение поставленной цели.

Вычислим производную целевой функции (5) в силу систем (1)

$$(7) \quad \dot{Q}(\phi_1, \dots, \phi_N) = \sum_{n=1}^{\mu} a_n p_n \Delta(g_n)^{p_n-1} L(Z_n) - \\ - \sum_{n=\mu+1}^N a_n \left(p_n \Delta(m_n)^{-p_n-1} \Delta(M_n)^{-p'_n} + p'_n \Delta(m_n)^{-p_n} \Delta(M_n)^{-p'_n-1} \right) L(Z_n).$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$(8) \quad \Delta(g_n) = \phi_n^* Z_n \phi_n - g_n,$$

$$(9) \quad L(Z_n) = \frac{1}{i\hbar} \phi_n^* ([Z_n, H_n] + u[Z_n, S_n]) \phi_n,$$

где $[A, B] = (AB - BA)$ – коммутатор операторов.

Подставляя полученное выражение в (6), получаем искомый алгоритм управления по обратной связи

$$(10) \quad u(\phi_1, \dots, \phi_N) = -\frac{\Gamma}{i\hbar} \sum_{n=1}^{\mu} a_n p_n \Delta(g_n)^{p_n-1} \phi_n^* [Z_n, S_n] \phi_n + \\ + \frac{\Gamma}{i\hbar} \sum_{n=\mu+1}^N a_n \left(p_n \Delta(m_n)^{-p_n-1} \Delta(M_n)^{-p'_n} + p'_n \Delta(m_n)^{-p_n} \Delta(M_n)^{-p'_n-1} \right) \phi_n^* [Z_n, S_n] \phi_n.$$

Замечание 1. Параметры алгоритма a_n, p_n, p'_n, Γ могут быть использованы для численной оптимизации и выполнения возможных дополнительных ограничений, наложенных на функцию управления.

Замечание 2. Предложенный алгоритм (10) может использоваться и для управления бесконечномерными системами при условии существования всех необходимых производных и корректной постановки задачи.

4. Исследование алгоритма управления

Лемма 1. *Задача Коши для системы уравнений (1) с управлением (10) и начальными условиями, удовлетворяющими ограничениям (3), имеет единственное решение, продолжимое на всю вещественную ось.*

Доказательство леммы приведено в Приложении.

Пусть $\lambda_n^k, h_n^k, k = 1, \dots, \nu$, – соответственно собственные числа и собственные вектора оператора $H_n, n = 1, \dots, N$; а через $z_n^k, k = 1, \dots, \nu$, обозначим собственные числа $Z_n, n = 1, \dots, N$. В соответствии с принятой в современной теории управления квантовомеханическими системами терминологией [1–7] состояние квантовой системы будем называть “чистым”, если фазовый вектор, соответствующий этому состоянию, является собственным для оператора энергии (т.е. состояния $e^{it}h_n^k, t \in \mathbb{R}$, – “чистые” относительно n -й системы). В классических трудах по квантовой механике [18, 19] такие состояния называются стационарными.

Теорема 1. *Пусть выполнены следующие предположения:*

A1. $[Z_n, H_n] = 0, n = 1, \dots, N$;

A2. $\lambda_n^k - \lambda_n^j \neq \lambda_m^r - \lambda_m^s, (n, k, j) \neq (m, r, s), k, j, r, s = 1, \dots, \nu, n, m = 1, \dots, N$;

A3. $(z_n^k - z_n^m)[(h_n^k)^* S_n h_n^m] \neq 0, n = 1, \dots, \mu, k, m = 1, \dots, \nu$;

A4. ограничения (3) при $t = 0$ выполнены;

A5. $Q^{-1}([0, Q(\phi_1(0), \dots, \phi_N(0))])$ не содержит чистых состояний систем $1, \dots, \mu$.

Тогда алгоритм управления (10) обеспечивает достижение цели управления (2) и выполнение ограничений (3).

Доказательство теоремы приведено в Приложении.

Замечание 3. Поскольку управление непрерывно, а фазовое пространство компактно, то путем выбора достаточно малого коэффициента усиления Γ достижение цели управления возможно с помощью сколь угодно малого управляющего воздействия.

Замечание 4. Условие A1 означает, что при отсутствии управления среднее значение наблюдаемых $Z_n, n = 1, \dots, N$, не изменяется. Условия A2, A3 достаточны для одновременной управляемости систем $1, \dots, \mu$. Отметим, что одновременной управляемости всех N систем не требуется.

Замечание 5. Если исключить условие A5, то возможно “застывание” траекторий систем в чистых состояниях. Однако при численном моделировании в рассматриваемых моделях эта ситуация ни разу не наблюдалась.

Исследуем поведение синтезированной системы при наличии погрешности в задании начального распределения и погрешности реализации управляющего воздействия. Предположим, что начальное условие n -й системы известно не точно, а приближенно: в начальный момент времени t_0 начальное распределение $\phi_n^0 = \phi_n^* + \delta\phi_n$, где ϕ_n^0 – действительное начальное условие, ϕ_n^* – расчетное начальное условие, $\delta\phi_n$ – 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 $\phi_n(t, \phi_n^0, u(t))$ обозначает траекторию n -й системы с начальным условием ϕ_n^0 и управлением $u(t)$. Следующее утверждение позволяет оценить погрешность достижения цели управления при заданных невязках.

Теорема 2 ([13, с. 67]). Для любого времени t при погрешностях в задании начального распределения и неточностях в реализации управляющего воздействия имеет место следующая оценка отклонения наблюдаемой n -й системы от рассчитанного значения:

$$(11) \quad \begin{aligned} & |\phi_n(t, \phi_n^0, u(t))^* Z_n \phi_n(t, \phi_n^0, u(t)) - \phi_n(t, \phi_n^*, u_*(t))^* Z_n \phi_n(t, \phi_n^*, u_*(t))| \leq \\ & \leq (2|\delta\phi_n| + |\delta\phi_n|^2 + 2\Delta(t) + \Delta^2(t)) \|Z_n\|, \\ & \Delta(t) = \frac{1}{\hbar} \|S_n\| \int_0^t |\delta u_k(t)| dt, \end{aligned}$$

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

Замечание 6. Если $\int_0^{+\infty} |\delta u(t)| dt < +\infty$, то можно в (11) заменить $\Delta(t)$ на $\Delta = \frac{1}{\hbar} \|S_n\| \int_0^{+\infty} |\delta u_k(t)| dt$.

5. Конечноразностная аппроксимация квантовой модели молекулы H_2

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

$$(12) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = H\Psi(r, t) + uS\Psi(r, t),$$

где

$$(13) \quad H = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) \right], \quad S = A\mu(r),$$

$$(14) \quad V(r) = D \left(\exp\left(-2\alpha \frac{r-r_0}{r_0}\right) - 2 \exp\left(-\alpha \frac{r-r_0}{r_0}\right) \right).$$

Здесь $i = \sqrt{-1}$ – мнимая единица; \hbar – постоянная Планка; $r \in (0, +\infty)$ – расстояние между атомами молекулы; $\Psi(r, t)$ – волновая функция, в каждый момент времени квадрат ее модуля имеет смысл плотности распределения величины r ; H – оператор полной энергии свободной системы; M – приведенная масса молекулы; $V(r)$ – потенциал Морзе; u – напряженность электрической составляющей внешнего лазерного поля; $\mu(r)$ – молекулярный дипольный момент; D, α, r_0 – параметры потенциала Морзе. Молекулярный дипольный момент в первом приближении можно положить равным $\mu(r) = Ar$, в дальнейшем будем считать, что $A = 1$. Значения параметров M и r_0 зависят от изотопного состава молекулы.

Потенциал Морзе часто используется для описания колебаний двухатомных систем. Считается, что он является более физичным, чем потенциал Кратцера [20]. Потенциал Морзе имеет глобальный минимум в точке равновесия системы $r = r_0$,

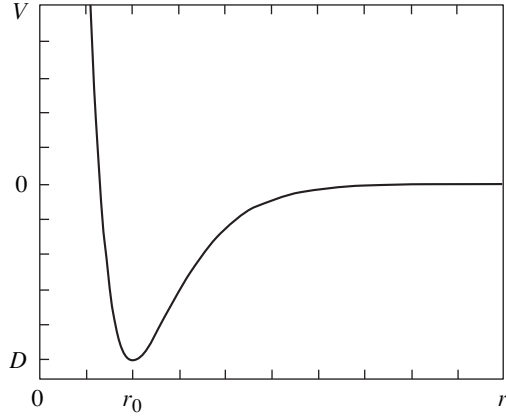


Рис. 2. Потенциал Морзе.

равный $-D$. 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. 2).

Собственные функции и соответствующие им собственные числа оператора H_0 с высокой точностью могут быть получены аналитически, путем сведения задачи к вырожденному гипергеометрическому уравнению [20]. Все собственные числа λ_k , отвечающие связанным состояниям (т.е. состояниям с отрицательной энергией: $\lambda_k < 0$), задаются следующими выражениями

$$(15) \quad \lambda_k = -D + \frac{1}{2Mr_0^2} \left(2\alpha\sqrt{2MDr_0^2} \left(k + \frac{1}{2}\right) - \alpha^2 \left(k + \frac{1}{2}\right)^2 \right),$$

$$(16) \quad 0 \leq k < \frac{\sqrt{2MDr_0^2}}{\alpha} - \frac{1}{2}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Соответствующие им собственные функции имеют вид

$$(17) \quad h_k(r) = B_k y^{-\frac{m_k}{2}} e^{\frac{1}{2}y} \frac{d^k}{dy^k} (y^{m_k+k} e^{-y}),$$

где

$$(18) \quad y = \frac{2\sqrt{2MDr_0^2}}{\alpha} \exp\left(-\alpha \frac{r-r_0}{r_0}\right), \quad m_k = 2 \frac{\sqrt{-2M\lambda_k r_0^2}}{\alpha},$$

а B_k – нормировочные коэффициенты. Сделаем важное замечание: согласно (16) множество собственных чисел, соответствующих связанным состояниям, конечно.

Одним из методов упрощения задачи исследования системы (12) является использование конечномерного приближения. Несмотря на открытость вопроса о физической адекватности такого упрощения, этот подход является достаточно распространенным [5]. В настоящей работе рассматривается конечноуровневая аппроксимация по всем собственным функциям, соответствующим связанным состояниям молекулы

$$(19) \quad i\hbar\dot{\phi} = \widehat{H}\phi + uS\phi, \quad \phi \in \mathbb{C}^\nu,$$

где для оператора \widehat{H} и его ортонормированных собственных векторов \widehat{h}_k , $k = 0, \dots, \nu$, выполнены соотношения

$$(20) \quad \widehat{h}_k^* \widehat{H} \widehat{h}_k = \lambda_k, \quad k = 0, \dots, \nu,$$

$$(21) \quad \widehat{h}_p^* \widehat{S} \widehat{h}_q = A \int_0^{+\infty} r h_p^*(r) h_q(r) dr, \quad q, p = 0, \dots, \nu.$$

Расчет матрицы \widehat{S} выполняется численно и требует значительных вычислительных ресурсов (для рассмотренного примера двухатомной молекулы при учете 16 энергетических уровней занимает 4 ч на машине Pentium 4).

Методом априорных оценок [21] возможно доказать сходимость конечномерных приближений, построенных по методу Бубнова – Галеркина, к точному решению уравнения (12) и получить соответствующие оценки на погрешность приближения. К сожалению, математически строгое изложение этого результата привело бы к неоправданному существенному увеличению статьи и отвлекло бы внимание читателя от основного результата.

6. Задача селективного управления энергией молекул ${}^1H^1H$ и ${}^1H^2H$

Рассматриваются молекулы двух типов ${}^1H^1H$ и ${}^1H^2H$, верхний индекс в написании формулы при литере атома обозначает количество нейтронов, входящих в его состав. Для описания динамики молекул воспользуемся конечномерным приближением (19) уравнения (12):

$$(22) \quad i\hbar \dot{\phi}_n = \widehat{H}_n \phi_n + u \widehat{S}_n \phi_n, \quad \phi_n \in \mathbb{C}^{17}, \quad n = 1, 2,$$

где $n = 1$ соответствует ${}^1H^1H$, а $n = 2$ – ${}^1H^2H$. Использовались следующие значения параметров [20] уравнения (12) (атомная система единиц Хартри)

${}^1H^1H$	$\hbar = 1$	$M = 918,5$	$r_0 = 1,4014$	$D = 0,1745$	$\alpha = 1,44$	$\nu = 17$
${}^1H^2H$	$\hbar = 1$	$M = 1224,4$	$r_0 = 1,2138$	$D = 0,1745$	$\alpha = 1,44$	$\nu = 17$

В качестве начального состояния системы бралось распределение Гиббса, соответствующее температуре $T = 300^\circ K$:

$$(23) \quad \phi_n(0) = C \left(\exp\left(\frac{-\lambda_n^0}{kT}\right), \dots, \exp\left(\frac{-\lambda_n^{\nu-1}}{kT}\right) \right)^T, \quad n = 1, 2,$$

где k – постоянная Больцмана, а C – нормировочный коэффициент (в атомной системе единиц Хартри $k = 1$, $T = 9,501 \cdot 10^{-4}$).

Ставилась задача стабилизации наблюдаемой $\phi_1(t)^* \widehat{H}_1 \phi_1(t)$ на целевом значении $g_1 = -0,09$ при верхнем ограничении на динамику $\phi_2(t)^* \widehat{H}_2 \phi_2(t)$, равным $M = -0,14$. Параметры алгоритма управления (10) были следующими: $p_1 = 2$, $p_2 = 0$, $p'_2 = 0,1$, $a_1 = 400$, $a_2 = 2$, время моделирования $t_f = 4134,11$ (соответствует 100 фс). Численная оптимизация по параметру Γ методом градиентного поиска с функционалом качества (X. Рабиц [17])

$$(24) \quad J(u) = \sum_{k=1}^{\mu} (\phi_k(t_f)^* H_k \phi_k(t_f) - g_k)^2 + \alpha \int_0^{t_f} u^2(t) dt,$$

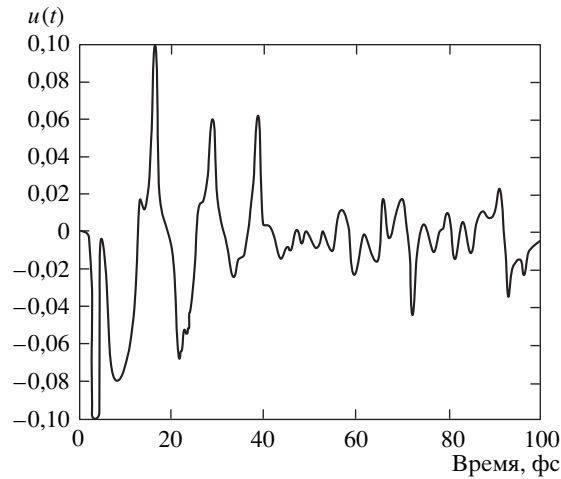


Рис. 3. График функции управления $u(t)$.

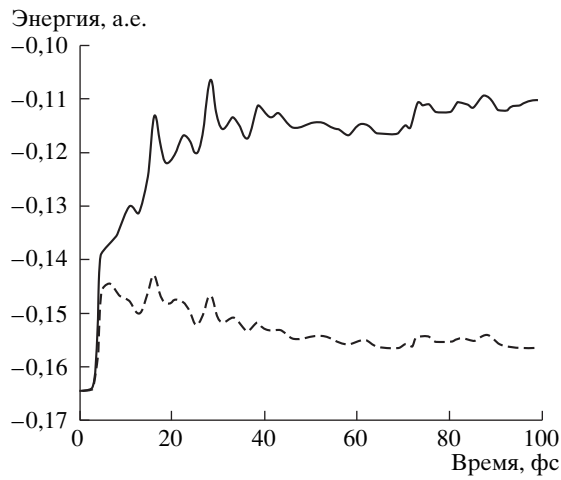


Рис. 4. График эволюции средних значений энергий $\phi_1(t)H_1\phi_1(t)$ и $\phi_2(t)H_2\phi_2(t)$.

где $\alpha = 0,02$ дала значение $\Gamma = 4,8$. Подставив в алгоритм управления (10) значения параметров, получим

$$(25) \quad u(\phi_1, \phi_2) = -i \left(3840|\phi_1^*H_1\phi_1 + 0,09|\phi_1^*[H_1, S_1]\phi_1 + 0,96 \frac{\phi_2^*[H_2, S_2]\phi_2}{|\phi_2^*H_2\phi_2 + 0,14|^{1,1}} \right).$$

Результаты численных расчетов представлены на рис. 3, 4. На рис. 3 изображена функция управления (25), а на рис. 4 – эволюция средних значений энергий. Энергия молекулы ${}^1H^1H$ стремится к своему целевому значению, в то время как энергия ${}^1H^2H$ не пересекает установленную границу. Хорошо видно, что предложенный алгоритм может эффективно выполнять цель управления и для начальных данных, лежащих вне области, указанной в теореме, залипания траекторий в чистых состояниях не наблюдается.

7. Заключение

Работа посвящена разработке и исследованию алгоритмов селективного управления наблюдаемыми для квантовомеханических систем при ограничениях, наложенных на весь период управления. Предложен новый алгоритм управления наблюдаемыми, основанный на методе скоростного градиента с новым видом целевой функции. Даны теоретические и экспериментальные оценки его эффективности. Сформулированы и доказаны условия достижения цели управления. За пределами этих условий эффективность предложенного алгоритма продемонстрирована с помощью численного моделирования для задачи о селективном управлении энергией молекул водорода (H_2), содержащих разные изотопы. Полученные оценки чувствительности алгоритма показывают, что погрешность вычисления значения наблюдаемой пропорциональна погрешности в исходных данных и погрешности реализации управляющей функции.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Доказательство леммы 1. Обозначим через Ω область, в которой выполнены ограничения (3). Функция $u(\phi_1, \dots, \phi_N)$, задаваемая выражением (10), в области Ω непрерывна, следовательно, правые части систем (1) также непрерывны, откуда заключаем, что решение задачи Коши существует на некотором временном интервале. Поскольку вдоль траекторий системы целевая функция $Q(\phi_1, \dots, \phi_N)$ не возрастает, то неограниченное приближение траекторий к границе Ω невозможно (на границе $Q(\phi_1, \dots, \phi_N) = +\infty$). Следовательно, правые части системы (1) ограничены, а, значит, решение продолжимо на всю вещественную ось.

Доказательство теоремы 1. Для системы (1) с управлением (10) рассмотрим в качестве функции Ляпунова целевую функцию $Q(\phi_1, \dots, \phi_N)$. Она обладает следующими свойствами:

- V1. $Q(\phi_1, \dots, \phi_N) \geq 0$;
- V2. $\dot{Q}(\phi_1, \dots, \phi_N) = -\Gamma^{-1}u^2 \leq 0$ (см. условие A1 и выражения (6) и (7));
- V3. $\forall x \in \Omega : Q^{-1}(x)$ – компактное множество.

Следовательно, можно применить теорему Ла-Салля [16], которая утверждает, что предельным множеством для траекторий рассматриваемой системы будет максимальный инвариант множества уровня 0 производной целевой функции в силу системы $I(\dot{Q}^{-1}(0))$.

Выделим два важных свойства множества $I(\dot{Q}^{-1}(0))$:

- C1. на нем $u \equiv 0$ (т.к. $u^2 = -\Gamma u \nabla_u \dot{Q}(\phi_1, \dots, \phi_N) = -\Gamma \dot{Q}(\phi_1, \dots, \phi_N) = 0$);
- C2. на нем $\dot{\Delta}(g_n) = \dot{\Delta}(m_n) = \dot{\Delta}(M_n) = 0$, (т.к. $\frac{d}{dt}(\phi_n^* Z_n \phi_n) = \frac{1}{i\hbar} u \phi_n^* [Z_n, H_n] \phi_n = 0$).

По определению $I(\dot{Q}^{-1}(0))$ состоит из целых траекторий и согласно свойству C1 управление вдоль них равно нулю. Следовательно,

$$(П.1) \quad \phi_n(t) = \exp\left(\frac{1}{i\hbar} H_n t\right) \phi_n(0) = \sum_{k=1}^{\nu} \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \lambda_n^k t\right) h_n^k x_n^k, \quad n = 1, \dots, N,$$

где для $n = 1, \dots, N$, $k = 1, \dots, \nu$: λ_n^k , h_n^k – соответственно собственные числа и собственные вектора оператора H_n , а $x_n^k = (\phi_n(0), h_n^k)$ – коэффициенты разложения вектора начальных условий $\phi_n(0)$ по h_n^k .

Рассмотрим выражение (7) на множестве $I(\dot{Q}^{-1}(0))$. Перепишем его, учитывая предположение А1 и свойство С2:

$$(II.2) \quad \dot{Q}(\phi_1, \dots, \phi_N) = \sum_{n=1}^N c_n \phi_n(t)^* [Z_n, S_n] \phi_n(t),$$

где c_n , $n = 1, \dots, N$, – некоторые константы. Подставим выражение для траекторий (II.1) в (II.2) и приравняем последнюю нулю:

$$(II.3) \quad \sum_{n=1}^N c_n \left(\sum_{k=1}^{\nu} \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \lambda_n^k t\right) h_n^k x_n^k \right)^* [Z_n, S_n] \left(\sum_{k=1}^{\nu} \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \lambda_n^k t\right) h_n^k x_n^k \right) \equiv 0.$$

Раскроем скобки и заметим, что согласно А1 вектора h_n^k , $k = 1, \dots, \nu$, являются собственными для операторов Z_n , $n = 1, \dots, N$:

$$(II.4) \quad \sum_{n=1}^N \sum_{k,m=1}^{\nu} \left(c_n (x_n^k)^* x_n^m (z_n^k - z_n^m) [(h_n^k)^* S_n h_n^m] \exp\left(\frac{\lambda_n^m - \lambda_n^k}{i\hbar} t\right) \right) \equiv 0.$$

Из условия А2 следует, что экспоненты линейно независимы, а значит, все коэффициенты в этой линейной комбинации равны нулю. Согласно предположению А3 в условии теоремы $(z_n^k - z_n^m) [(h_n^k)^* S_n h_n^m] \neq 0$ при $n = 1, \dots, \mu$.

Следовательно, $c_n (x_n^k)^* x_n^m = 0$ при $n = 1, \dots, \mu$, $k, m = 1, \dots, \nu$, $k \neq m$. Если существует $c_n \neq 0$, тогда n -я система находится в чистом состоянии, что невозможно согласно условию А5. Значит, все траектории системы стремятся к множеству, на котором c_n равны нулю при $n = 1, \dots, \mu$, что эквивалентно выполнению цели управления. Осталось показать выполнение ограничений (3).

Согласно выбору управления, целевая функция не возрастает. На границе множества Ω (где ограничения (3) выполнены) она равна $+\infty$. Следовательно, траектории системы, начинаясь в Ω (условие А4), никогда ее не покинут.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бутковский А.Г., Самойленко Ю.И.* Управление квантовомеханическими процессами. М.: Наука, 1984.
2. *Pearson B.J., White J.L., Weinacht T.C. et al.* Coherent control using adaptive learning algorithms // *Phys. Rev. A.* 2001. V. 63. № 6. P. 634–676.
3. *Brixner T., Kiefer B., Gerber G.* Problem complexity in femtosecond quantum control // *Chem. Phys.* 2001. V. 267. P. 241–246.
4. *Rice S., Zhao M.* Optical control of quantum dynamics. N.Y.: Wiley, 2000.
5. *Brown E., Rabitz H.* Some mathematical and algorithmic challenges in the control of quantum dynamics phenomena // *J. Math. Chem.* 2002. V. 31. № 1. P. 17–63.
6. *Mabuchi H., Khaneja N.* Principles and application of control in quantum systems // *Int. J. Robust Nonlinear Control.* 2005. № 15. P. 646–667.
7. *Bloembergen N., Zewal A.H.* // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 88. P. 5459–5465.
8. *Goggin M.E., Milonni P.W.* Driven Morse oscillator: Classical chaos, quantum theory and photodissociation // *Phys. Rev. A.* 1988. V. 37. № 3. P. 796–806.
9. *Chelkowski S., Bandrauk A.D.* Coherent interaction of an ultrashort zero-area laser pulse with a Morse oscillator // *Phys. Rev. A.* 1990. V. 41. P. 6480–6484.
10. *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. 5174–5181.

11. *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. 1292–1295.
12. *Lin J.T., Lai T.L., Chuu D.S., Jiang T.F.* Quantum dynamics of a diatomic molecule under chirped laser pulses // *J. Phys. B.* 1998. V. 31. P. 117–126.
13. *Ананьевский М.С., Фрадков А.Л.* Управление наблюдаемыми в конечноуровневых квантовых системах // *АиТ.* 2005. № 5. С. 63–75.
14. *Ananyevskiy M.S., Vetchinkin A.S., Sarkisov O.M. et al.* Quantum control of dissociation of an iodine molecule by one and two femtosecond laser pulses excitation // *Proc. Int. Conf. "Physics and Control 2005"*. St. Petersburg. 2005. P. 636–641.
15. *Turinici G., Ramakrishna V., Li B., Rabitz H.* Optimal discrimination of multiple quantum systems: controllability analysis // *J. Phys. A.* 2004. V. 37. P. 273–282.
16. *Мирошник И.В., Никифоров В.О., Фрадков А.Л.* Нелинейное и адаптивное управление сложными динамическими системами. СПб.: Наука, 2000.
17. *Peirce A., Dahleh M., Rabitz H.* Optimal Control of Quantum Mechanical Systems: Existence, Numerical Approximations and Applications // *Phys. Rev. A.* 1988. V 37. P. 4950–4964.
18. *фон Нейман И.* Математические основы квантовой механики. М.: Наука, 1964.
19. *Дирак П.* Принципы квантовой механики. М.: Наука, 1979.
20. *Флудге С.* Задачи по квантовой механике 1. М.: Мир, 1974.
21. *Лионс Ж.-Л.* Некоторые методы решения нелинейных краевых задач. М.: Мир, 1972.

Статья представлена к публикации членом редколлегии Л.Б. Рапопортом.

Поступила в редакцию 15.02.2007