itüdergisi/***d***
mühendislik
Cilt:9, Sayı:5, 39-46
Ekim 2010

Doğrusal kuvantum sistemlerin eniyilemeli denetiminde kritik süreler

Esma MERAL*, Metin DEMİRALP

İTÜ Bilişim Enstitüsü, Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programı, 34469, Maslak, İstanbul

Özet

Bu çalışmada doğrusal yapılandırılmış kuvantum sistemlerin eniyilemeli denetimi üzerine odaklanılmıştır. Hareket denklemlerinin oluşturumu ve sonra da çözümü üzerinde çalışmalarda bulunulmuştur. Potansiyel tanımında konuma bağımlılıkta, bağımsız değişkenlerin en çok ikinci dereceden olan kuvvetlerinin ya da onların ikili çarpımlarının doğrusal birleşimi alınmaktadır. Bu yapılar, sonunda birinci basamaktan sıradan türevli bir denklem takımıyla tanımlanabilen duruma getirilebilmektedir. Bu denklem takımında bağımsız değişken zaman parametresi olmakta ve değeri 0 ile etkileşme süresini gösteren T değeri arasında değişebilmektedir. Denklem takımına eşlik eden koşulların yarısı etkileşimin başında diğer yarısı ise sonunda verildiğinden "Zamanda Sınır Değer Problemi" nitelikli matematiksel bir yapıyla karşılaşılmaktadır. Çalışma dalga fonksiyonu ile eşdüzey fonksiyonunu değil, özellikle, dış alan genliği ile sapma parametresinin belirlenmesini amaçlamaktadır. Denklemlerin yapılarının elvermesinden yararlanarak, sadece zamana bağımlı olan ve aslında herbiri ya bir beklenen değer ya da dalga fonksiyonunun tanımladığı düzey ile eşdüzey fonksiyonunun tanımladığı düzey arasında geçiş değeri olan bilinmeyenler üzerinde sıradan türevli denklem takımları oluşturmak amaçlanmış ve başarılmıştır. Denklem takımının oluşturulması bütünüyle özgün olarak üretilmiş bulunmaktadır. İncelenen durumlardaki doğrusal yapılandırım, elde edilen sıradan türevli denklemlerin de doğrusal yapılı olmasına olanak sağlamıştır. Sınır değerli bu denklemlerin, ağırlıkların analitik olması durumunda kesin olarak çözümü sağlanmış diğer durumlar için önerilen bir saptırım açılımınınsa tüm parametre değerleri için yakınsak olacağı gösterilmiştir. Eniyilemeli denetimde denetim süresinin çözümün gerçekte uygulanabilirliğini çok önemli biçimde etkilediği gösterilmiştir. Sayıları sonsuz olabilen kritik denetleme süreleri için dış alan genliğinin ve sapmanın sonsuza gidebildiği bazı denetim sürelerinin ise sapmayı sıfırlama olanağı verebildiği de gösterilmiştir.

Anahtar Kelimeler: *Kuvantum mekaniği, optimal kontrol, dalga fonksiyonu, harmonik salınıcı.*

*Yazışmaların yapılacağı yazar: Esma MERAL. esmameral@be.itu.edu.tr; Tel: (212) 285 70 82.

Bu makale, birinci yazar tarafından İTÜ Bilişim Enstitüsü Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programı'nda tamamlanmış olan "Doğrusal yapılandırımlı kuvantum sistemlerin en iyilemeli denetiminde analitik sonuçlar, yaklaştırımlar, kritik denetim süreleri" adlı doktora tezinden hazırlanmıştır. Makale metni 24.04.2009 tarihinde dergiye ulaşmış, 18.06.2009 tarihinde basım kararı alınmıştır. Makale ile ilgili tartışmalar 31.01.2011 tarihine kadar dergiye gönderilmelidir.

Critical control times in optimal control of linear quantum system

Extended abstract

This work focuses on the evaluation of critical control times in the optimal control of linear quantum systems. The linearity is used to imply the existence of only linear intra forces in the system. This means that the system under consideration is composed of harmonic oscillators.

The linearity is not only in the forces. The external field's dipole polarizability function is also taken linear in spatial variables. Beyond that the objective operator whose expectation value's deviation from its target value should be minimized in square and the penalty operator whose expectation value is to be suppressed are also linear in position and momentum operators.

We assume that the system has 3N degree of freedom and the cost functional for the optimal control is composed of four terms:

(1) objective term which is the square of the objective operator whose expectation value's deviation from its prescribed target;
(2) penalty term for getting finiteness in external field;
(3) penalty term for an operator whose norm is to be suppressed ;
(4) dynamical constraint term which enters the quantum motion of the system to the optimisation. This cost functional depends on five unkowns: (1-2) wave function and its complex conjugate; (3-4) costate function which is in fact the Lagrange multiplier of the dynamical constraint term. It varies in time and space and somehow describes the backward motion of the system from the final instant of the control. It is a complex valued function hence its complex conjugate is the companion unknown to itself;
(5) The external field amplitude within the dipole the polarizability approximation. It is temporal and real valued.

There may be a shorthand notation for the deviation of the expectation value of the objective operator from its target value. In that case, this entity can be considered as another unknown and can be handled by adding its definition as an extra condition. The equations of motion can be optained by setting the first variation of the cost functional to zero. Four partial differential equations are obtained for themselves and complex conjugates of the wave and costate functions. The equations for the wave function are accompanied by initial conditions while the costate function related partial differential equations are right hand sided and accompanied by final conditions. This for equations two by two, describes forward and backward evolutions for the system and these evolutions are connected by the algebraic however functional relation obtained for the external field amplitude. All these equations are non linear for the general case. However for the present linearity assumptions they become linear.

The equations of motion mentioned above are not attempted to be solved. Instead, ordinary differential equations for the expectation values of position and momentum operators on the wave function and the transition terms between the states decscribed by the wave and costate functions are constructed. These temporal ODEs are linear but may be timevariant in the coefficients if the weight functions of the penalty terms are temporally varying. The simplest case involves the cases where these weights are constansts and the ODEs can be analytically solved in terms of an exponentials matrix. This results in analytic expressions for the unknowns. These expressions depend not only on time but olsa control time (T). As can be shown by rigorous analytical analysis and verified by the numerical implementations, there are certain critical values of the control time where the extressions grow up to infinity or vanishes. Vanishing values mean exact achievement of the target value by the expectation value of the objective operator. These are the best control instants where the goal is exactly achieved. On the other hand, control times causing infinite jumps, are just the time instants the control becomes infeasible.

The critical control times creating infinite jumps are called "Critical Control Times for Uncontrollability" and it is important to know these values before attempting the experimentation to avoid uncontrollability. Otherwise, experiment is wasted out. The critical control times which make the deviation of the expectation values of the objective operator from its target value are called "Critical Control Times for Exact Achievement" and they are useful to get the best control. Paper contains all important issues about these points.

Keywords: *Quantum mechanics, optimal control, wave function, harmonic oscillator.*

Giriş

Kuvantum mekaniksel bir sistemin durumu, yani belli bir andaki konum momentum ve enerji gibi fiziksel özellikleri $\psi(t)$ ile gösterilen ve "Dalga Fonksiyonu" olarak adlandırılan bir büyüklük tarafından tanımlanır (Schiff, 1955).

Elektromanyetik bir alanın verilen bir sistem üzerindeki etkisini Schrödinger denkleminde belirletebilmek için alanın sisteme etki ettirdiği kuvveti matematiksel olarak anlatabilmek gerekir. Bu kuvvet bir potansiyel teriminden türemektedir. Potansiyel terimi en genel halinde, birisi "Skaler Alan" diye adlandırılan ve matematik olarak skaler bir fonksiyonla tanımlanabilen diğeri ise "Vektör Alan" diye adlandırılan ve vektör değerli bir fonksiyonla tanımlanabilen iki bileşenden oluşur (Rabitz ve Zhu, 2000). Bu çalışmada incelemelerin daha kolay olması açısından skaler alan ile ilgilenilmiştir. Böyle bir durumda, serbestlik derecesi *n* olan bir kuvantum sistem üzerine elektromanyetik bir alanın etkisi, *q*'lar Hamilton kuramındaki konum değişkenlerini göstermek üzere,

$$H_{em} = E(t)D(q_1,...,q_n) \qquad (1)$$

biçiminde bir terimle matematikselleştirilebilir. Burada *E(t)* sözü edilen alanın genliğini göstermekte olup yalnızca zamanla değişen bir büyüklüktür. $D(q_1,...,q_n)$ ise alanın yalnızca konuma bağlı olan çarpanını göstermektedir.

Bir sistemin kuvantum optimal denetiminin matematiksel modellemesi, denetim altındaki sistemin belirli davranışlarını yansıtacak biçimde seçilmiş, bir amaç fonksiyoneli üzerinden gerçekleştirilir. Amaç fonksiyoneli aşağıdaki şekilde verilir (Demiralp ve Rabitz, 1993):

$$J = J_0 + J_p^{(1} + J_p^2 + J_{cd} \qquad (2)$$

Son ifadede J_0 ile amaç fonksiyonelinin hedeften sapma terimi gösterilmektedir.

Amaç fonksiyonelinde bulunması istenilen diğer önemli bir olgu, yaptırım operatörü (penalty operator) olarak adlandırılabilen, katkısı istenmeyen, gözlemlenebilen bir büyüklüğün beklenen değerinin bastırılması yani karesinin olabildiğince küçük kılınması istemidir (Yaman ve Demiralp, 2003). Bu terim amaç fonksiyonelinde $J_p^{(1)}$ ile gösterilmektedir.

İkinci yaptırım terimi, dış alan genliğinin sonsuz değer almasını engelleme yani değerini sonlu kılmaya yöneltme istemine karşılık gelir. Bu terim de amaç fonksiyonelinde $J_p^{(2)}$ ile temsil edilmektedir.

Son kısıt ise dalga fonksiyonunun kuvantum mekaniğinin temel denklemini sağlaması gerekliliğinden ortaya çıkar. Schrödinger denklemi bir bağ ya da ek koşul olarak amaç fonksiyoneli yapısına alınmalıdır. Bu ise "Lagrange Çarpanı" olarak nitelendirilebilen, hem zamana ve hem de uzay değişkenlerine bağlı olan ve λ ile simgelenen bir fonksiyon aracılığı ile sağlanabilir. Yani bir bilinmeyen olan ve dalga fonksiyonuna benzer nitelikler taşıyacağı açık olan ve de "Eşdüzey Fonksiyonu" olarak da adlandırıla-bilen bir büyüklüğün kullanımıyla hep gerçel değerler üretebilecek bir kısıt olarak J_{cd} ifadesi verilebilir.

Sistemin eniyilemeli devinimini belirleyen dinamik denklemler J'nin birinci varyasyonunun 0'a eşitlenmesi ile elde edilir. J'nin birinci mertebe varyasyonu; $E(t)$, $\psi(t)$ ve $\lambda(t)$ büyüklüklerinin bra ve ketlerinin birinci mertebe varyasyonları türünden bir doğrusal birleşim olarak anlatılabilir. Bu doğrusal birleşim açık olarak yazılıp, birleşimin katsayıları ayrı olarak sıfıra eşitlenecek olursa 5 adet devinim denklemine ulaşılır.

Beklenen değer ve geçiş değer tabanlı bilinmeyen tanımları

Deneysel olarak gözlenebilen ya da ölçülebilen bütün özellikler bir takım operatörlerle tanımlanır (Demiralp ve Rabitz, 1993; Monhinsky ve Smirnov, 1996). Bu operatörlere karşılık gelen sayısal değerler "Beklenen Değer" olarak adlandırılır. Bir operatör üzerinden bir düzeyden diğer düzeye geçişi karakterize eden değer de "Geçiş Değeri" (ing:Transition Value) olarak adlandırılabilir (Tunga ve Demiralp 2003). Sözgelimi, Re $(<\lambda(t)|\hat{O}|\psi(t)>)$ büyüklüğü dalga fonksiyonu ile eş düzey fonksiyonu arasında $\hat{O}$ üzerinden geçiş olasılığını karakterize eder. *E(t)*'nin bulunmasına yönelik çalışmalar yapılırken aşağıdaki tanımlamalar yapılıp işlemlere girişilebilir:

$$q_i(t) \equiv <\psi(t)|\,y_i\,|\psi(t)>, \quad 1 \le i \le 3N \tag{3}$$

$$p_i(t) \equiv <\psi(t)|-i\hbar\frac{\partial}{\partial y_i}|\psi(t)>, \quad 1 \le i \le 3N \tag{4}$$

$$q_i(t) \equiv 2\,\mathrm{Re}(<\lambda(t)|\,y_i\,|\psi(t)>), \quad 1 \le i \le 3N \tag{5}$$

$$r_i(t) \equiv 2\,\mathrm{Re}(<\lambda(t)|-i\hbar\frac{\partial}{\partial y_i}|\psi(t)>), \quad 1 \le i \le 3N \tag{6}$$

E(t) anlatımı bu bilinmeyenler cinsinden aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$E(t) = \frac{1}{W_E(t)}\sum_{j=1}^{3N}\mu_j s_j(t) \tag{7}$$

(3) ve (4) eşitliklerinin zamana göre türevleri alındığında;

$$\frac{d\mathbf{z}(t)}{dt} = \mathbf{A}(t)\mathbf{z}(t) \tag{8}$$

ile gösterilen bir kısmi türevli diferansiyel denklem takımına ulaşılır.

Burada *z(t)* ile $z^T = [p(t), q(t), r(t), s(t)]$ matrisi temsil edilmektedir. **A(t)** matrisinin ve ilişkili diğer matrislerin ve vektörlerin açık ifadeleri aşağıda verilmektedir:

$$\mathbf{A}(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{B} & \frac{1}{W_E(t)}\mathbf{u}_1\mathbf{u}_2^{\mathbf{T}} \\ -W_p(t)\mathbf{u}_3\mathbf{u}_4^{\mathbf{T}} & \mathbf{B} \end{bmatrix} \tag{9}$$

$$\mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\mu} \end{bmatrix} \tag{10}$$

$$\mathbf{u}_3 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}' \\ -\boldsymbol{\beta}' \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{u}_4 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}' \\ \boldsymbol{\alpha}' \end{bmatrix} \tag{11}$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & -\boldsymbol{\kappa} \\ \frac{1}{m_e}\mathbf{I}_{3N} & 0 \end{bmatrix} \tag{12}$$

(8) numaralı eşitlikte gözüken **A(t)** matrisi $J_p^{(1)}$ ve $J_p^{(2)}$ kısıt terimlerinde gözüken $W_p(t)$ ve $W_E(t)$ ağırlık fonksiyonlarına bağımlı bir matristir. (8) ile verilen denklemin [0,T] aralığında ağırlık fonksiyonlarının değerlerine bağlı olarak tekil noktaları olabilir. Eğer bu fonksiyonların *t*-karmaşık düzleminin [0,T] aralığını içeren bir bölgesinde, artı tanımlı ve sürekli olduklarını varsayarsak (8) denkleminin seçilen aralığın tüm noktalarında sürekli olduğu sonucuna varırız. Bu da, çözümün *t*'nin eksi olmayan kuvvetleri türünden sonsuz bir seri toplam şeklinde yazılabileceği anlamına gelir. Böylece (8) denklemindeki ***z(t)*** için

$$z(t) = Z(t)c \tag{13}$$

yazılabilir. Burada **c** vektörü, değeri henüz belirlenmemiş olan, değişmez elemanlardan oluşan bir vektörü göstermektedir. (8) ile (13)'ün birlikte düşünülmesi ile

$$\frac{dZ(t)}{dt} = A(t)Z(t), \qquad Z(0) = I_{12N} \tag{14}$$

yazılabilir. **Z**(t) matrisi sistemin davranışının zaman içinde ileriye doğru evrimini karakterize eder. Bu nedenle "İleri Evrim Matrisi" olarak adlandırılabilir.

Bundan sonra özetlenen çalışmada başlıca durağan ağırlıklar durumuna odaklanılmaktadır. Bu durumda dış alan fonksiyonu ile bastırılması istenilen operatörlerle ilgili amaç fonksiyoneli integrallerinde ağırlık olarak verilen $W_p(t)$ ve

$W_E(t)$ fonksiyonlarının [0,T] aralığında birer değişmez oldukları varsayılmaktadır. Bu değişmezler artık W_E ve W_p ile simgelene-cektir.

İndirgeyici ölçeklemeler

(14) eşitliğindeki **A** matrisi elemanlarının, bazı sabitlerin değerlerinin 1 alınması ile fiziksel ölçü birimlerinden arınmaları sağlanabilir. Ancak, yine de **A** matrisi bloklarının daha uygun bir ölçekleme kullanımıyla daha az parametre içerecek bir biçime indirgenmelerinin bazı yararları bulunmaktadır. Bu amaçla aşağıdaki türden bir matrisle dönüşüm yaparak sonuca ulaşmak olanaklıdır:

$$\overline{M} = \begin{bmatrix} \overline{m_1} I_{6N} & 0 \\ 0 & \overline{m_2} I_{6N} \end{bmatrix} \tag{15}$$

Burada $\overline{m}_1$ ve $\overline{m}_2$ değeri belli olmayan büyüklüklerdir. (14) eşitliğinde Z(t) yerine $\overline{M}\,\overline{Z(t)}$ yerleştirirsek,

$$\frac{d\overline{Z(t)}}{dt} = \overline{M}^{-1} A \overline{M}\,\overline{Z}(t), \quad \overline{Z}(0) = \overline{M}^{-1} \tag{16}$$

eşitliği elde edilir. (16) eşitliğinin sağ tarafındaki katsayılar matrisinin sağ üst ve sol alt dışçarpım matrislerinin katsayılarının mutlak değerce birbirine eşit olacağı şekilde bazı seçimlerin ve ara işlemlerin yapılması ardından ilgili matris aşağıdaki şekle dönüşür:

$$\overline{A} = \overline{M}^{-1} A \overline{M} = \begin{bmatrix} B & \nu \overline{u}_1 \overline{u}_2^T \\ -\nu \overline{u}_3 \overline{u}_4^T & B \end{bmatrix} \tag{17}$$

Burada u_1, u_2, u_3 ve u_4, $6N$ elemanlı vektörleri simgelemektedir. ν ile gösterilen katsayı ise ikikutuplaşma ile yaptırım operatörü katsayılarına bağımlı bir büyüklüktür.

Böylece (16) eşitliği aşağıdaki daha yalın görünümlü yapıya büründürülmüş olur:

$$\frac{d\overline{Z(t)}}{dt} = \overline{A}\,\overline{Z}(t), \quad \overline{Z}(0) = \overline{M}^{-1} \tag{18}$$

Denetim süresinin kritik değerlerinin asimptotik davranışı

Şimdi (18)'deki matrisi aşağıdaki şekilde bileşenlerine ayıralım :

$$\overline{\mathbf{A}} \equiv \mathbf{A}_0 + \nu \mathbf{A}_1 \tag{19}$$

$$A_0 \equiv \begin{bmatrix} B & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix} \tag{20}$$

$$A_1 \equiv \begin{bmatrix} 0 & \overline{u}_1 \overline{u}_2^T \\ \overline{u}_3 \overline{u}_4^T & 0 \end{bmatrix} \tag{21}$$

Sonra da

$$U(t,\nu) \equiv e^{t(A_0 + \nu A_1)} \tag{22}$$

tanımını yapalım. Buradaki ν parametresi tanımlandığı büyüklüklere bağımlı olarak çok küçük değerler alabilir. Bu doğrultuda, dış alandaki μ parametresi önemli rol oynar. Onun küçük değerleri hem dış alanın güçsüzlüğü anlamına gelir hem de ν parametresini küçük kılar. Bu bağlamda, dış alanın etkisi olmadığı durumda, ν de 0 olur. ν'nun varlığı, her ne kadar analitik yapıda da olsa, $U(t,\nu)$ matrisinin açık olarak yazılabilmesini kısıtlar. Bu nedenle, hiç değilse ν'nun çok küçük değerleri için bir inceleme yapıp bu matrisin asimptotik davranışını belirlemek önemlidir. Bu yoldan, denetim süresinin tam denetim ya da denetimsizlik durumlarında karşılık gelen kritik değerleri üzerine de konuşmak olanaklı olur.

Son tanımdan türev alarak aşağıdaki sıradan türevli matris denkleme ulaşılabilir:

$$\frac{dU(t,\nu)}{dt} = (A_0 + \nu A_1) U(t,\nu), \qquad U(0,\nu) = I \tag{23}$$

Bu denklemin çözümü olarak, aşağıdaki, ν'nun doğalsayı üslüleri türünden bir saptırım açılımı (ing:perturbation) öngörebiliriz (Demiralp ve Rabitz, 1994; Rabitz ve Zhu, 2005):

$$U(t,\nu) \equiv \sum_{j=0}^{\infty} \nu^j U_j(t) \tag{24}$$

Bu öngörümün (23)'de kullanımından ve her iki yanın ν'nun üslüleri türünden yeniden düzenlenmesinden sonra ν içermeyen terimlerin denk olması gereksiniminden

$$\frac{dU_0(t)}{dt} = A_0 U_0(t), \qquad U_0(0) = I \tag{25}$$

denklemine ulaşılır. Bu denklemin çözümü

$$U_0(t) = e^{tA_0} = \begin{bmatrix} e^{tB} & 0 \\ 0 & e^{tB} \end{bmatrix} \tag{26}$$

eşitliğiyle verilir ve ν'nun tam olarak 0 değerini aldığındaki yapıyı karakterize eder. Burada görünen **B** matrisini içeren üstel fonksiyon, trigonometrik bir yapıdadır ve (16) eşitliği ile açık ifadesi verilmiştir.

B matrisindeki trigonometrik yapı $U_0(t)$ matrisine birden çok frekanslı peryodik salınım özelliği verir. Ancak, öyle de olsa $U_0(t)$ blok köşegen bir yapıdadır ve köşegen dışı blokları sıfır da olsa $U(t,\nu)$ matrisinin aynı bloklarının sıfır olması gerekmez. Sıfırlanma, ancak $\nu = 0$ için geçerlidir. Öyleyse, sıfır alınmak yerine, bu blokların ν, 0'a giderken nasıl davranacağının belirlenmesi daha önemli konuma gelir. Bunun için $U_1(t)$ matrisinin belirlenmesi gerekir. (24) öngörümünün (23)'te kullanımından ve her iki yanın ν'nun üslüleri türünden yeniden düzenlenmesinden sonra salt ν ile orantılı olan terimlerin, eşitliğin her iki yanında denk olması gereksiniminden aşağıdaki denklem ve eşlik eden başlangıç koşuluna ulaşılabilir:

$$\frac{dU_1(t)}{dt} = A_0 U_1(t) + A_1 U_0(t), \qquad U_1(0) = 0 \tag{27}$$

Bu denklemin kesin çözümü, ayrıntıları verilmeyecek olan bir takım ara işlemlerden sonra aşağıdaki biçimde yazılabilir:

$$U_1(t) = \int_0^t d\tau e^{(t-\tau)A_0} A_1 e^{\tau A_0} \tag{28}$$

Bu eşitlik, A_0 ve A_1 matrislerinin açık yapıları kullanılarak, aşağıdaki blok matrisli anlatım yapısına büründürülebilir:

$$U_1(t) = \begin{bmatrix} 0 & f_1(t) \\ f_2(t) & 0 \end{bmatrix} \tag{29}$$

Matristeki $f_1(t)$ ve $f_2(t)$ fonksiyonlarının değerleri aşağıda verilmiştir:

$$f_1(t) = \int_0^t d\tau e^{(t-\tau)B} \overline{u}_1 \overline{u}_2^T e^{\tau B} \tag{30}$$

$$f_2(t) = \int_0^t d\tau e^{(t-\tau)B} \overline{u}_3 \overline{u}_4^T e^{\tau B} \tag{31}$$

Böylece, ν 0'a giderken, ν^2 düzeyinde bir yanılgı payı içerisinde

$$U(t,\nu) \approx U_0(t) + \nu U_1(t) \tag{32}$$

yazılabilir. (18) denkleminin kesin çözümünü biçimsel olarak

$$\overline{Z}(t) = e^{t\overline{A}} \overline{M}^{-1} \tag{33}$$

anlatımı ile vermek olanaklıdır.

$U(t,\nu)$ ile $\overline{Z}(t)$ arasında, (33) eşitliğinden dolayı,

$$\overline{Z}(t) = U(t,\nu) \overline{M}^{-1} \tag{34}$$

ilişkisi kurulabileceğinden $\overline{Z}(t)$'nin blokları için aşağıdaki asimptotik eşitlikler yazılabilir:

$$\overline{Z}_{11}(t) \approx e^{tB} \tag{35}$$

$$\overline{Z}_{12}(t) \approx m_2 \nu \int_0^t d\tau e^{(t-\tau)B} \overline{u}_1 \overline{u}_2^T e^{\tau B} \tag{36}$$

$$\overline{Z}_{21}(t) \approx \nu \int_0^t d\tau e^{(t-\tau)B} \overline{u}_3 \overline{u}_4^T e^{\tau B} \tag{37}$$

$$\overline{Z}_{22}(t) \approx m_2 e^{tB} \tag{38}$$

Sapma parametresi kesirli bir ifade olup pay ve paydasında **Z** matrisinin blokları yer almaktadır (35), (36), (37) ve (38) eşitliklerinin sapma parametresinde kullanılması ardından, sapma parametresinin paydasındaki 1'den çıkarılan terim için aşağıdaki eşitlik yazılabilir.

$$\mathrm{v}_3^T \overline{Z}_{12}(T) \overline{Z}_{22}(T)^{-1} \mathrm{v}_2 = T\nu \int_0^1 d\tau \mathrm{v}_3^T e^{T\tau B} \overline{u}_1 \overline{u}_2^T e^{-T\tau B} \mathrm{v}_2 \tag{39}$$

Son eşitlikteki $\mathbf{v}_2$ ve $\mathbf{v}_3$ vektörleri katsayıları amaç operatörü katsayıları olan *6N* elemanlı vektörleri göstermektedir.

Burada integral değişkeni üzerinde *T* ile ölçekleme yaparak integral aralığı [0,1]'e dönüştürülmüştür ve integraldeki toplama yönü de tersine çevrilmiştir. Daha kolay bir inceleme yapabilmek için aşağıdaki skaler fonksiyonları tanımlamakta yarar bulunmaktadır:

$$\sigma_1(t) = \mathrm{v}_3^T e^{tB} \overline{u}_1 \tag{40}$$

$$\sigma_2(t) = \overline{u}_2^T e^{-tB} \mathrm{v}_2 \tag{41}$$

Bunların kullanımı ile (39) eşitliği aşağıdaki yapıya büründürülmüş olur:

$$\mathrm{v}_3^T \overline{Z}_{12}(T) \overline{Z}_{22}(T)^{-1} \mathrm{v}_2 = T\nu \int_0^1 d\tau \sigma_1(T\tau) \sigma_2(T\tau) \tag{42}$$

Sonuçlar

$\sigma_1(t)$ ve $\sigma_2(t)$ fonksiyonlarının değişik frekansları olabilen sinüs ve kosinüs işlevlerinin doğrusal birleşimi olduğu ortaya çıkarılmıştır. Yani bunlar, devirli olarak salınan fonksiyonlar olma durumundadır.

Bu fonksiyonların $T\tau$ değişkenlilerinin de aynı davranışı göstereceğini açıktır. Ayrıca T de frekanslar içinde çarpan durumundadır. Bu nedenle denetim süresi arttıkça frekansların tümü de doğrusal orantılı olarak artacaktır.

Bu sonuçlar, bunların çarpımının integralinin de aynı tür davranışı göstereceği anlamına gelir. Yani son denklemin sağ yanı, T arttıkça 0'ın etrafında aşağı yukarı salınacaktır. Bu salınım genliğinin $T\nu$ ile çarpılıyor olması nedeniyle, bu büyüklüğün değerinin artmasıyla paydada, T'ye göre, devirli olarak sonsuz sayıda sıfırlanmaya neden olacaktır. Bu biraz anlaşılmaz gibi görünebilir. Çünkü ν'nun çok küçük değerleriyle çalışılmaktan söz edilmektedir. Bunda bir yanlışlık da yoktur, çünkü, sözgelimi salt μ'nun değiştirilmesiyle ν değerini, *T*'yi değiştirmeksizin, çok küçültmek olanaklıdır. Yani, *T* ve ν bağımsız olarak değiştirilebilen büyüklüklerdir.

Dolayısıyla, yukarıda (24) numaralı eşitlik ile verilen saptırım açılımının ilk iki terimini alıkoyacak düzeyde ν'yu küçük tutmak ve Tν değerini de payda da sonsuz sayıda sıfırlanma olacak düzeyde büyük tutmak olanaklıdır.

Sapma parametresinin paydasını 0 yapan *T* değerlerine "Denetim Süresi'nin Denetlenemezliğe Yolaçan Kritik Değerleri" adı verilebilir ve sistemin uygun özellikler taşıması durumunda, *T'*nin yeterince büyük değerleri için sonsuz sayıda kritik değer bulunabilecektir.

Benzer durum sapma parametresinin payı için de geçerlidir. Yani payı 0 yapan değerler söz konusudur ve *T* arttıkça, belli bir *T* değerinden büyük değerler için, sonsuz sayıda değerler bulunabilir. Bunlar da, bir anlamda, kritik değerlerdir. Çünkü, bu değerlerde sapma parametresi sıfırlanır. Bu ise, amaç teriminin sıfırlanması yani amaç operatörünün beklenen değerinin öngörülen erek değerine kesin olarak erişmesi demektir. Buna "Kesin Denetim" ve bunu sağlayan denetim sürelerine de "Kesin Denetime Yolaçan Denetim Süresi Kritik Değerleri" adını verebiliriz.

Ancak, burada, bu iki değişik türde kritik değer takımının belirlenmesi için çaba gösterilmemiştir. Çünkü, bu işlemin nasıl gerçekleştiği yukarıda anlatılmıştır ve burada salt o bilgi ile yetinmek yeterli görülmektedir.

Kaynaklar

Demiralp, M. ve Rabitz, H., (1993). Optimally controlled quantum molecular dynamics. The effect of nonlinearities on the magnitude and multiplicity of control-field solutions, *Physical Review*, **A.47**, 816.

Demiralp, M. ve Rabitz, H., (1994). Optimal control of classical molecular dynamics: A perturbation formulation and the existence of multiple solutions, *Journal of Mathematical Chemistry*, **16**, 185.

Monhinsky, M. ve Smirnov, Y.F., (1996). The harmonic oscillator in modern physics, Harwood Academic Publishers, Amsterdam.

Rabitz, H. ve Zhu, W., (2000). Optimal control of molecular motion: Design, implementation and inversion, *Accounts of Chemical Research*, **33**, 572-578.

Rabitz, H. ve Zhu, W., (2005). Perturbative and Non-perturbative master equations for open quantum systems, *Journal of Mathematical Physics*, **46**, 022105

Schiff, L.I., (1955). *Quantum mechanics*, McGraw-Hill, New York.

Tunga, B. ve Demiralp, M., (2003). Optimally controlled dynamics of one dimensional harmonic oscillator: Linear dipole function and quadratic penalty, *ANACM Applied Numerical Analysis and Computational Mathematics*, **1**, 245-253.

Yaman, I. ve Demiralp, M., (2003). Optimal control of one dimensional quantum harmonic oscillator under an external field with quadratic dipole function and penalty on momentum: Construction of the linearised field amplitude integral equation, *ANACM Applied Numerical Analysis and Computational Mathematics*, **1**, 277-286.