2.4. Quantenkontrolle

Klass. Anwendung adaptiver Kontrolle:

Kostenfkt. enthält Hamilton-Fkt.: $Q(q,p) = \frac{1}{2}(H(q,p) - H_*)$
mit H_* als Zielenergie

quantenmechanische Systeme:

Schrödinger-Gl. $i\hbar\dot{\psi} = (\underbrace{H_0}_{\substack{\text{ohne Kontrolle} \\ \text{(freies System)}}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{m} u_k H_k}_{\substack{\text{Kontroll-Hamiltonop.} \\ \text{(Kontrollpar. } u_k)}})\psi$

Ziel: Konstruiere u_k, so dass Observable Z im Mittel einen vorgegebenen Wert Z_* annimmt:

$$\lim_{t\to\infty} \underbrace{\psi^*(t) Z \psi(t)}_{\text{Skalarprodukt } \int \psi^* Z \psi \, d^3r \equiv (\psi, Z\psi) = \langle\psi|Z|\psi\rangle} = Z_*$$

Idee: speed gradient method anwenden:

$$Q(\psi) = (\psi^* Z \psi - Z_*)^2$$

$$\lim_{t\to\infty} Q(\psi) = 0$$

Ann.: Z kommutiert mit H_0 (gleichzeitig scharf messbar, keine Beeinflussung des qu. Systems nur durch Messung von Q)

$$\nabla_{u_k} \dot{Q} = \nabla_{u_k} \left[2(\psi^* Z \psi - Z_*)(\dot{\psi}^* Z \psi + \psi^* Z \dot{\psi}) \right]$$

$$= \underline{\nabla}_{u_k} \left[2\,(\psi^* Z \psi - Z_*)\, \frac{i}{\hbar}\, \psi^* \Big(H_0 Z - Z H_0 + \sum_{k=1}^{m} u_k (H_k Z - Z H_k) \Big)\psi \right]$$

$$\text{mit} \quad \dot{\psi} = -\frac{i}{\hbar}\Big(H_0 + \sum_k u_k H_k\Big)\psi$$

$$\Rightarrow \quad \dot{u}_k = -\Gamma\, \underline{\nabla}_{u_k} \dot{Q} = -\Gamma \frac{2i}{\hbar} (\psi^* Z \psi - Z_*) \big(\psi^* (H_k Z - Z H_k)\psi\big)$$

$\Rightarrow$ adaptive Gl. für Kontrollpar. u_k

Anwendung: Kontrolle chem. Reaktionen auf molekularer Ebene:

Kontrolle durch speziell geformte Laserpulse, die gewünschte Reaktionskanäle öffnen.

Lit. z.B. T. Brixner (Würzburg):
Phys. Chem. Chem. Phys. **9**, 2470 (2007)
Chem. Phys. Chem. **4**, 418 (2003)

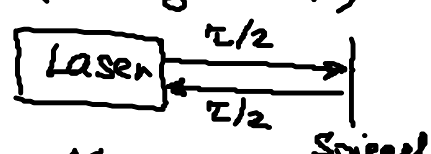
3. Zeitverzögerte Rückkopplungsverfahren

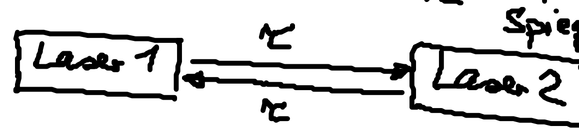
3.1 Retardierte komplexe Systeme

Delay-Differenzialgln.: $\dot{x}(t) = f(x(t)) + g(x(t-\tau))$

Verzögerungszeit τ

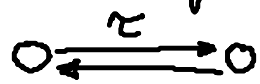
Delay (Retardierung) ist weitverbreitet in nichtlin. Syst.

- mech. Systeme: Trägheit
- elektron. Stromkreis: Signalverarbeitungszeiten (Latenzzeiten), kapazitive Effekte
- optische Systeme: Signallaufzeiten (Lichtgeschw.)
  - Laser mit opt. Rückkoppl. 

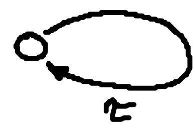
  - 2 gekoppelte Laser 

– biolog. Systeme: Zell-Zyklus-Zeit τ
biolog. Uhren

– neuronale Netzwerke: zeitverzögerte Kopplung



zeitverzögerte Rückkopplung



z.B. biochem. Prozesse
(Neurotransmitter)
neuro-vaskuläre Koppl.

<u>Retardierung generiert reichhaltiges komplexes Verhalten</u>

- Retardierung erhöht die Phasenraumdim. einer ODE (ordinary diff. eqs.) auf unendlich.
  Anfangsbed. auf ganzem Intervall $[-\tau, 0]$ notwendig
  history function $x(t)$ auf $-\tau \leq t \leq 0$
- Einfache Dgl. produzieren komplexes nichtlin. Verhalten
  – delay-induzierte Bifurkationen, Instabilitäten
  – delay-induzierte Multistabilität
  – Stabilisierung von instab. period. oder stat. Zuständen
  – Chaoskontrolle (Unterdrückung von Chaos)

Lit.: T. Erneux: Applied delay differential eqs. (Springer 2009)
P. Hövel: Control of Complex Nonlin. Systems with Delay (Springer 2010)
V. Flunkert: Delay-Coupled Complex Systems (Springer 2011)
Just, Pelster, Schanz, Schöll (eds): Delayed complex systems
(Theme Issue of Phil. Trans. Roy. Soc. A 368 (2010))

<u>3.2 lin. Stabilitätsanalyse retardierter Diff.gln</u>

einfachste lin. Delay-Dgl. $\dot{x} = -ax(t) + bx(t-\tau)$ $\quad a, b \in \mathbb{R}$

Anf. bed. $x(t) = \phi(t) \quad -\tau \leq t \leq 0$

Fixpkt. $x^* = 0$

kleine Störung: $x(t) \sim e^{\Lambda t}$

$\Rightarrow \Lambda e^{\Lambda t} = -a e^{\Lambda t} + b e^{\Lambda t} e^{-\Lambda \tau}$

$$\boxed{\Lambda = -a + b e^{-\Lambda\tau}}$$ transzendente char. Gl. für Eigenwert $\Lambda \in \mathbb{C}$

Lösung für Λ: $\underbrace{(\Lambda + a)\tau}_{z} = b\tau e^{-\Lambda\tau}$

$$z e^{z} = b\tau e^{a\tau}$$

inverse Fkt. von $z e^{z} = y$: $z = W_\ell(y)$ Lambert-Fkt.

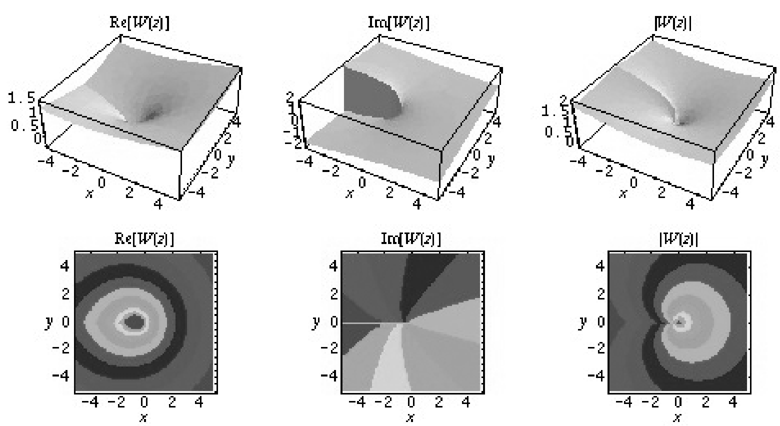
(vielblättrig, $\ell \in \mathbb{Z}$)

(cf $e^{z} = y \Leftrightarrow z = \ln y$)

$$\Rightarrow \Lambda_\ell = -a + \frac{1}{\tau} W_\ell(b\tau e^{a\tau})$$

($a > 0$: stab. Fixp. ohne Delay
$a < 0$: inst. " " ")

allg. Lös. $x(t) = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} c_\ell e^{\Lambda_\ell t}$



Hauptzweig

$$W_0(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-n)^{n-1}}{n!} z^n$$

$$\left(|z| < \frac{1}{e} \right)$$

asymptot. Entwicklung für $z \to 0$ u. $z \to \infty$ ($\ell \neq 0$)

$$W_\ell(z) \approx \ln z + 2\pi i \ell - \ln(\ln z + 2\pi i \ell)$$

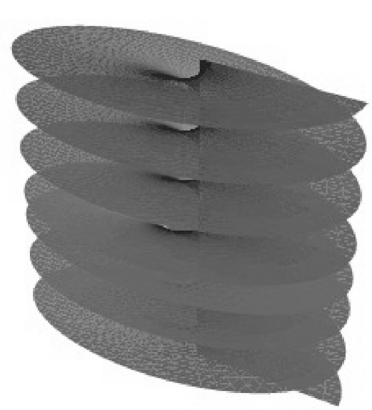
$\tau \to 0$ ($z \to 0$):

$$W_\ell(z) \approx \underbrace{\ln z}_{\downarrow \atop -\infty} + 2\pi i \ell + \text{höhere Ordn.}$$

$$\boxed{\Lambda_\ell \to -\infty \quad \forall \ell \neq 0}$$

Re W(z)

Im W(z)



$$\tau \to \infty \quad (z \to \infty): \Lambda_\ell \approx -\underline{a} + \frac{1}{\tau}\left[\ln(b\tau) + \underline{a\tau} + 2\pi i \ell - \ln(\ln z + 2\pi i \ell)\right]$$

Lit. Amann, Schöll, Just: Physica A $\underline{373}$, 191 (2007)