## ОБОЗРЕНИЕ ПРИКЛАДНОЙ И ПРОМЫШЛЕННОЙ

Том 2 МАТЕМАТИКИ Выпуск 1 1995

## САМОЙЛЕНКО Ю.И. МЕТОДЫ УПРАВЛЕНИЯ АНСАМБЛЯМИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ МИКРОЧАСТИЦ

Рассмотрены теоретические и прикладные аспекты проблемы управления квантовыми и классическими ансамблями микроскопических объектов, взаимодействующих между собой и с внешними управляющими полями. Предложена общая формальная схема описания таких систем, основанная на алгебро-геометрических методах теории управления. Получены необходимые условия оптимальности управления внутренним состоянием обобщенного ансамбля по макроскопическим критериям качества при заданных краевых условиях. Установлена аналогия между управляемой эволюцией лиувиллиевского ансамбля и вращением по инерции многомерного волчка.

## § 1. Введение

Вопросы, которым уделяется основное внимание в статье, возникли в связи с быстрым развитием недавно сформировавшегося направления, охватывающего проблемы преобразования информации и управления на микроскопическом уровне пространственных масштабов. Отдельные ветви этого направления известны как наноэлектроника, молекулярная электроника, биокомпьютинг, молекулярная кибернетика и молекулярная информатика. К нему примыкают также некоторые специальные разделы физики мезоскопических явлений, функционального материаловедения, молекулярного конструирования, нанотехнологии.

В целом указанное направление предусматривает создание в ближайшей перспективе принципиально новой информационно-технологической базы за счет более глубокого освоения закономерностей микромира. Ожидается, например, создание сверхминиатюрных роботов, снабженных индивидуальными сенсорами, актюаторами, средствами связи, искусственного интеллекта и передвижения. Такие роботы могли бы в контролируемых извне автономных режимах выполнять необходимые технологические операции в труднодоступных зонах (реакторах, скважинах, разветвленных трубопроводах). Их применение в медицине, по мнению экспертов, приведет к созданию принципиально новых методов

сосудистой и нейрохирургии, адресно локализованной терапии, диагностики на ранних стадиях заболеваний. Качественно новые возможности предвидятся и в других сферах приложений — биотехнологии, материаловедении, научном приборостроении, оргтехники и т. д.

На успешное решение перечисленных и других подобных задач было бы трудно надеяться без проведения большого объема исследований фундаментального характера. В создание первоначальных основ физики вычислительно-информационных процессов на субмикронном уровне рассмотрения внесли свой вклад многие ученые. Сейчас трудно установить однозначно те или иные приоритеты, однако несомненно, что лидирующая роль здесь принадлежала известному физику-теоретику Р. Фейнману. Уже в 1959 году он выступил с докладом под символическим названием «Еще много места в самом низу» [1] на годичном собрании Американского физического общества, где обратил внимание на огромные потенциальные возможности использования явлений и устройств сверхминиатюрных масштабов. И хотя тогда электроника уже переходила на новую планарную технологию, речь шла о еще более глубоком понимании сущности информационных микропроцессоров как в технике, так и в биологии.

К тому времени в теории управления алгебро-геометрические методы еще только начинали формироваться и не могли адекватно применяться к объектам и процессам атомно-молекулярного уровня. Тем не менее, на необходимость учета квантовомеханических и других физических ограничений при рассмотрении вопросов микронаблюдения и микроуправления одним из первых обратил внимание академик А. А. Красовский [2], внесший большой вклад в распространение методов теории управления на теоретическую физику.

На основе теории управления сред с пространственно-временной дисперсией, разработанной ранее [3] применительно к проблеме управления высокотемпературной плазмой, автором этих строк в 1971 году была предложена концепция построения компьютера на управляемых квантовых системах [4]. Ограничения со стороны гейзенберговской неопределенности преодолимы, как оказалось, за счет отказа от классических форм представления дискретной информации. Этот принцип получил в дальнейшем дополнительное подтверждение на основе алгебраического подхода в работе [5], которая была прокомментирована в обзоре [6] в качестве первой публикации по квантовым вычислительным устройствам.

С начала 80-х годов поток работ по данной тематике быстро возрастает, о чем можно судить по списку публикаций, рассмотренных в упомянутом обзоре. Итоги начального периода ее формирования подвел Р. Фейнман своей статьей [7], где он, пользуясь языком операторов рождения и уничтожения элементарных возбуждений взаимодействующих двухуровневых квантовых систем, привел явные выражения для модельных гамильтонианов некоторых элементов обратимой логики и

двоичного сумматора. Анализ дальнейших исследований проведен в [8].

В настоящее время работы по созданию элементной базы вычислительной техники с использованием квантоворазмерных эффектов в наноэлектронных структурах значительно продвинуты. Они опираются на уникальные технологические возможности, созданные за последние годы благодаря быстрому развитию туннельной микроскопии и туннельной литографии, которые позволяют осуществлять контролируемую сборку структур с необходимыми свойствами на уровне атомов и молекул. Высокого уровня достигли и пленочные технологии Ленгмюра—Блоджетт для формирования моно- и полимолекулярных слоев, а также имплантирования в них фотореакционных центров. Активно ведутся работы и в биофизическом направлении. Все это создает реальные предпосылки для успешной реализации ранее намеченной программы, однако все больше осознаются и многие принципиальные трудности, среди которых одними из важнейших представляются следующие.

- 1. Сложность осуществления ввода и вывода информации при информационном взаимодействии микро- и макроскопических уровней иерархии в квантовой логико-динамической системе.
- 2. Опасность возникновения явлений динамического хаоса при потере устойчивости тактовых отображений последования в элементах обратимой логики.
- 3. Увеличение влияния тепловых флуктуаций при сокращении числа степеней свободы для представления одного бита информации.
- 4. Возрастание плотности мощности тепловыделения с увеличением плотности потока информации за счет диссипативных эффектов.
- 5. Тенденция к деградации неустойчивых наноструктур за счет термодиффузии, побочных химических процессов и туннелирования.

Для решения научных проблем, связанных с созданием атомномолекулярной и наноэлектронной базы перспективных информационных технологий, целесообразно объединить усилия математиков, физиков, химиков, биологов, кибернетиков. В этом важную роль призваны сыграть такие междисциплинарные объединения, как Международное общество по молекулярной электронике и биокомпьютингу (МЕВС). Его первым президентом был избран профессор Конрад (США) — один из инициаторов биомолекулярного направления [6]. Начиная с 1991 года, МЕВС регулярно проводит рабочие встречи, выпускает информационные бюллетени, издает научный журнал. По инициативе группы кибернетиков, физиков, математиков и биологов Украины создан междисциплинарный Фонд ученых и специалистов по молекулярной кибернетике и информатике (ФМКИ), содействующий проведению фундаментальных и прикладных исследований, на базе которого планируется учредить региональный центр МЕВС. Активизация исследований по супертехнологиям электроники и смежным проблемам наблюдается сейчас во всех странах с развитым научно-технологическим потенциалом. Так, например, в  $\Phi$ РГ и Японии с этой целью выделены государством кредиты в сотни миллионов долларов. Это свидетельствует о важности проблемы в целом и немалых трудностях на пути ее решения.

В представленном ниже материале вопросы реализации вычислительных и управляемых физических процессов в ансамблях микрочастиц обсуждаются в обзорном порядке, отчасти на основе ранее полученных результатов, но с единой алгебро-геометрической точки зрения. Это позволяет оставаться в рамках общей формальной схемы описания систем как классической, так и квантовой физической природы, выбирая тот или иной базис представления. Принципиальное различие между обочми случаями заключено в специфике строения группы управляемого движения. В необходимых случаях, наряду с таким подходом, не исключается и непосредственное применение методов гамильтоновой или лагранжевой механики, если этим достигается физическая наглядность изложения.

Прежде всего, остановимся на общей характеристике типичных моделей и принципов описания управляемых систем взаимодействующих микрочастиц и их статистических ансамблей. Вначале дадим физическую интерпретацию существа проблемы, а затем — ее формализацию.