



Universidad
Zaragoza

Trabajo de Fin de Grado:
**Formalismo geométrico de la Mecánica
Cuántica y sus aplicaciones a modelos
moleculares**

Grado en Matemáticas

Autor:

David Martínez Crespo

Director:

Jesús Clemente Gallardo

Junio de 2019



Abstract

The aim of the following work is to discuss the controllability conditions of hybrid quantum-classical systems. On doing so our framework will be the geometrical formulation of both Classical and Quantum Mechanics.

In Chapter 1 an introduction of the hybrid formalism will be given in several steps. Our introduction starts with some results about symplectic geometry, the definition of Hamiltonian functions and its corresponding Hamiltonian vector fields. This discussion will lead us to introduce the Poisson algebra structure over the C^∞ functions over a Manifold.

Classical Mechanics is a field that provides a great quantity of examples of differentiable manifolds, the positions that can be reached from a double pendulum is sometimes presented as an example of the appearance of the Torus $S^1 \times S^1$ in those problems. With the tools already defined the Hamiltonian formulation of Classical Mechanics provides a geometrical framework for the description of Classical Dynamics. The approach of this formulation is slightly different from that of the double pendulum, the position manifold M is just the starting point of the study. The cotangent bundle of the position manifold, $M_C = T^*M$, is the differentiable manifold where Newton laws can be reformulated in terms of Hamiltonian vector fields. This reformulation takes its basis from the fact that the cotangent bundle of any differentiable manifold has a natural symplectic structure.

On the other hand in the usual formalism of Quantum Mechanics is made from a functional analytic point of view while, despite the fact that Schrödinger's equation presents the Hamiltonian operator as a multiplicative factor, the geometrical nature of Quantum Mechanics was not discussed until the early seventies. The main reason of such a great delay is that the natural space where quantum states live are infinite dimensional Hilbert spaces, \mathcal{H} and infinite dimensional manifolds are required to deal with this formulation. Fortunately many applications of Quantum Mechanics can be expressed in finite dimensional Hilbert spaces $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, as an example, molecular models always imply some way of bounding on its energies that turns \mathcal{H} finite dimensional.

In this context the structure of \mathbb{C}^n as a manifold is the natural framework of the geometrical formulation of Quantum Mechanics. The hermitian structure of the Hilbert space can be encoded as a Kähler manifold over a real manifold M_Q . Kähler manifolds are real differentiable manifolds of even dimension where the complex structure of a complex differentiable manifold is encoded and those are manifolds that present natural symplectic structures. In terms of this symplectic structure Schrödinger's equation becomes the expression of the integral curve of a Hamiltonian vector field of the Kähler manifold in the same way that Newton laws are rewritten on the Hamiltonian framework.

Kähler manifolds also present riemannian structures and the dynamics of Quantum Mechanics preserves this structure restricting the space of hamiltonian functions to the space of self-adjoint operators of \mathcal{H} . It is also known that physical states have a gauge symmetry on the norm and the global phase of the states. This fact motivates the discussion of the formulation

of Quantum Mechanics on complex projective spaces $C\mathbb{P}^{n-1}$ instead of just formulating the equations on \mathbb{C}^n .

The hybrid formalism is a result of the similarities of the preceding discussion. The hybrid manifold $\mathcal{S} = M_C \times M_Q$ has a natural symplectic structure where hamiltonian vector fields can be defined to describe an hybrid dynamics. Is in this context that molecular models can be described in an easier way for the needs of chemical and biological research.

Once the hybrid description is performed some interesting features can be discussed. In particular the control theory has a huge interest in molecular models. New methods could be developed on fields as Chemistry or Biology if the hybrid control theory reaches the sufficient level of development. This fact motivates our discussion on Chapter 2.

In Chapter 2 some results of controllability for control-affine systems will be presented, in particular sufficient conditions of controllability that are the classical tests of contolability. Our main goal is to stablish efficient criteria of controllability for hybrid systems that presents physical interests.

In order to simplify the study of controllability in hybrid quantum mechanical systems some sufficient conditions of controllability will be rewritten, for a family of hamiltonian systems with physical interest, in terms of the manifold $\mathcal{S} = M_C \times M_Q$. Our way to proceed will be to study the conditions that the classical tests imposes over the projected systems when projections over the classical or quantum manifolds M_C, M_Q are performed. Some necessary conditions will arise from that procedure and the sufficiency of those conditions, as well as their strength, will be discussed.

In Chapter 3 the necessary conditions developed in Chapter 2 will be tested with numerical computations of a particular example. As a way of solving this example optimal control and the Pontriaguin's maximum principle will be presented. In order to solve some examples specific algorithms are been developed an will be available for download in the Appendix pages.

Índice de Símbolos

Geometría diferencial:

T^*M	– Fibrado cotangente de la variedad M
ω	– Forma simpléctica sobre M
Ω	– Tensor de Poisson, inverso de ω para variedades simplécticas
g	– Métrica riemanniana
G	– Tensor 2 veces contravariante inverso de g
J	– Estructura (casi) compleja de la variedad M
$C^\infty(M)$	– Funciones $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ infinitamente diferenciables
$\{\cdot, \cdot\}$	– corchete de Poisson sobre las funciones $C^\infty(M)$
$\mathfrak{P}\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}$	– Álgebra de Poisson generada por las funciones $\gamma_1, \dots, \gamma_k \in C^\infty(M)$
$\mathfrak{X}(M)$	– Espacio vectorial de campos vectoriales de clase C^∞ .
$\bigwedge^1(M)$	– Espacio vectorial de 1-formas sobre M de clase C^∞
\mathcal{L}_X	– Derivada de Lie con respecto al campo vectorial X
$[\cdot, \cdot]$	– Conmutador de campos vectoriales sobre M
$Lie\{X_1, \dots, X_k\}$	– Espacio vectorial obtenido a partir del álgebra de Lie de los campos X_1, \dots, X_k

Mecánica Cuántica:

\mathcal{H}	– Espacio de Hilbert complejo
$End(\mathcal{H})$	– Endomorfismos de \mathcal{H}
$Autoadj(\mathcal{H})$	– Operadores autoadjuntos de \mathcal{H}
$ \psi\rangle$	– Estado cuántico, $ \psi\rangle \in \mathcal{H}$
$\langle\psi \varphi\rangle$	– Producto escalar de los estados $ \psi\rangle$ y $ \varphi\rangle$
$ A\psi\rangle$	– $A \psi\rangle$, acción del operador A sobre el estado $ \psi\rangle$
$f_A(\psi\rangle)$	– $\langle\psi A\psi\rangle$
$e_A(\psi\rangle)$	– $\frac{\langle\psi A\psi\rangle}{\langle\psi \psi\rangle}$

Teoría de control:

$\mathcal{A}(x, T)$	– Conjunto alcanzable a tiempo T desde x
$\mathcal{A}(x, \leq T)$	– Conjunto alcanzable a tiempo menor o igual a T desde x
$\mathcal{A}(x)$	– Conjunto alcanzable desde x

Agradecimientos

Me gustaría agradecer especialmente a Jesús Clemente por la gran cantidad de tiempo que ha dedicado a este trabajo durante el curso y a Cristian Boghiu por las largas discusiones sobre física que hemos mantenido.

Muchas gracias también a mis abuelos que trabajaron toda su vida para que sus nietos pudieran ir a la universidad.

Índice general

Abstract	I
Índice de Símbolos	III
1. Formalismo geométrico de los Sistemas Híbridos	1
1.1. El formalismo Hamiltoniano de la Mecánica Clásica	1
1.1.1. Variedades simplécticas en general	2
1.1.2. Estructura simpléctica del fibrado cotangente	3
1.1.3. Mecánica Hamiltoniana	5
1.2. Formalismo Geométrico de la Mecánica Cuántica	5
1.2.1. Las propiedades de \mathbb{C}^n como variedad real y las variedades de Kähler	6
1.2.2. La ecuación de Schrödinger en formulación tensorial	7
1.2.3. El espacio proyectivo $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$ como variedad \mathcal{P}	8
1.3. El formalismo híbrido	10
2. Control de los Sistemas Híbridos	11
2.1. Conjuntos alcanzables y Teoremas de controlabilidad.	11
2.2. Condiciones suficientes para el control de Sistemas Híbridos	13
2.2.1. Controlabilidad clásico-híbrida y cuántico-híbrida.	14
2.2.2. Control híbrido	18
2.3. Conclusiones	19
3. Resolución numérica de un problema de control híbrido.	21
3.1. Control óptimo	22
3.2. Resolución numérica	22
3.3. Conclusiones	24
4. Conclusiones	25
Bibliografía	26
Anexos	27
A. Boceto de la prueba del Teorema 2.4	29
B. Construyendo el ejemplo	31
C. Ecuaciones del Capítulo 3	33
C.1. Ecuaciones de la dinámica	33
C.2. Ecuaciones del control óptimo	33

D. Programas para la resolución numérica	35
D.1. Ecuaciones de control óptimo	35
D.2. Integración numérica	37
D.3. Ejemplos de controlabilidad	38

Capítulo 1

Formalismo geométrico de los Sistemas Híbridos

Las leyes de Newton son el punto de partida de la Mecánica Clásica. Estas describen las ecuaciones del movimiento de N partículas puntuales en el espacio afín euclídeo \mathbb{R}^3 . Desde su publicación en 1686 diversas reformulaciones de la teoría se han ido desarrollando basadas en el concepto de espacio de configuraciones y espacio de fases, en los cuales las posiciones y velocidades, o las posiciones y momentos permitidos de cada partícula, son los espacios de base en los que se desarrolla la teoría. En el caso más simple estos se corresponden con el espacio \mathbb{R}^{6N} .

El formalismo Hamiltoniano, basado en el concepto de espacio de fases, encuentra una formulación en términos de variedades simplécticas que permite utilizar, de una manera natural, herramientas de Geometría Diferencial para abordar los problemas de Mecánica Clásica.

Por otra parte, desde principios del siglo XX se conoce la naturaleza cuántica de los sistemas físicos cuyo punto de partida es la ecuación de Schrödinger y cuyo espacio de trabajo es el espacio de estados que, como se expondrá más adelante, se obtiene como el espacio proyectivo de un espacio de Hilbert \mathcal{H} .

Desde finales de los 70 se viene desarrollando una formulación para la Mecánica Cuántica, similar a la formulación hamiltoniana de la Mecánica Clásica. Bajo este formalismo se pueden desarrollar, de una manera natural, técnicas híbridas en las que parte del sistema se modeliza siguiendo las leyes de Newton y otra parte siguiendo las leyes de la Mecánica Cuántica. Estos son los llamados Sistemas Híbridos. Estos sistemas son de gran interés en la modelización de sistemas moleculares debido a la alta complejidad de resolver las ecuaciones de los sistemas moleculares como sistemas completamente cuánticos.

De ahora en adelante, salvo mención expresa de lo contrario, se supondrá por simplicidad que $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, de dimensión finita. Ya que los sistemas en consideración nacen con el ánimo de disminuir la complejidad de los problemas a la hora de ser resueltos, prácticamente todos los sistemas de interés a considerar dentro de este formalismo cumplirán esta condición. Por ejemplo en sistemas moleculares se suele suponer que se trabaja con un número de autoestados de la energía, o discretizando el dominio de las funciones de onda.

1.1. El formalismo Hamiltoniano de la Mecánica Clásica

El formalismo Hamiltoniano reescribe las ecuaciones de Newton a partir de una función hamiltoniana, que representa la energía del sistema en función de la configuración que este tiene en el espacio de fases. En este espacio cada partícula viene representada por sus tres coordenadas espaciales y sus tres momentos lineales conjugados, sin embargo el movimiento puede estar confinado en una variedad M .

EL formalismo Hamiltoniano encuentra su formulación natural en el fibrado cotangente $M_C = T^*M$, de la variedad M . El fibrado cotangente presenta de manera natural una forma simpléctica ω y es en términos de esta que las ecuaciones de Hamilton son derivadas.

El objetivo de esta sección es mostrar cómo la mecánica clásica puede describirse gracias a las propiedades como variedad simpléctica del fibrado cotangente T^*M . Con esta finalidad podría presentarse la idea de variedad simpléctica únicamente ilustrando el caso del fibrado cotangente. Este es el camino seguido en [1]. Sin embargo, las propiedades de las variedades simplécticas son interesantes en casos más generales. Como ejemplos tenemos la estructura de Kähler que se mostrará en la Sección 1.2 o la teoría de control óptimo que veremos brevemente en el Capítulo 3. Por esta razón plantearemos aquí una introducción general a las variedades simplécticas y luego tomaremos el caso particular del fibrado cotangente.

1.1.1. Variedades simplécticas en general

Definición 1.1. Sea M una variedad diferenciable real, una *forma simpléctica* ω sobre M es una 2-forma cerrada no degenerada sobre M . En otras palabras:

- a) ω es un campo tensorial 2 veces covariante, ω_m es el campo tensorial evaluado en un punto $m \in M$.
- b) $\omega_m : T_mM \times T_mM \rightarrow \mathbb{R}$ es una aplicación bilineal.
- c) $\omega_m(u, v) = -\omega_m(v, u) \forall u, v \in T_mM$
- d) $d\omega = 0$ donde d representa la derivada exterior. (ω es cerrada)
- e) $\omega_m(u, v) \forall v \in T_mM$ entonces $u = 0$ (ω es no degenerada)

Definición 1.2. Al par (M, ω) , definidos como en la Definición 1.1, se le llama *variedad simpléctica*.

Debido a la condición de no degeneración, es claro que la dimensión de M debe ser par para admitir una estructura simpléctica, $\dim(M) = 2N$

Sabemos por el teorema de Darboux ([1] p. 230) que en M existe un atlas tal que las coordenadas de un punto de M son $(Q^1, \dots, Q^N, P_1, \dots, P_N)$ y en dichas coordenadas la forma simpléctica se escribe

$$\omega = \sum_{i=1}^N dQ^i \wedge dP_i, \quad (1.1)$$

donde \wedge es el producto exterior.

Con esta estructura podemos pasar a definir los campos vectoriales Hamiltonianos que serán la base para describir la dinámica en mecánica clásica.

Definición 1.3. Sea M una variedad simpléctica como en la Definición 1.2, sea $H \in C^\infty(M)$, un *campo vectorial hamiltoniano* con respecto a H es un campo vectorial X_H sobre M que cumple

$$\omega(X_H, \cdot) = dH. \quad (1.2)$$

Gracias a la no degeneración de ω podemos invertir la relación (1.2) definiendo un tensor de Poisson.

Definición 1.4. Para una variedad simpléctica el *tensor de poisson* Ω es el único tensor 2 veces contravariante que cumple

$$X_H = \Omega(\cdot, dH), \quad (1.3)$$

donde H y X_H son los de la Definición 1.3.

Teniendo definido de manera unívoca X_H podemos considerar las curvas integrales de dicho campo $\phi_{X_H}(t)$. Estas trayectorias preservan la forma simpléctica ω ¹ y serán las trayectorias que nuestro sistema clásico seguirá.

Por último, es conocido que las funciones $C^\infty(M)$ forman un espacio vectorial real con respecto a la suma y, junto con el producto usual de funciones, un álgebra asociativa. Gracias al tensor Ω puede introducirse una operación en $C^\infty(M)$ para dotarlo de estructura de *álgebra de Poisson*. Esta estructura puede extenderse a variedades más generales llamadas variedades de Poisson.

Definición 1.5. Sea M una variedad diferenciable, una operación interna a $C^\infty(M)$, que denotamos $\{\cdot, \cdot\}$ y cumple:

- a) $\{f, g\} = -\{g, f\} \quad \forall f, g \in C^\infty(M) \quad (\text{Antisimétrica})$
- b) $\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \quad \forall f, g, h \in C^\infty(M) \quad (\text{Identidad de Jacobi})$
- c) $\{f, gh\} = \{f, g\} + \{f, h\} \quad \forall f, g, h \in C^\infty(M) \quad (\{f, \cdot\} \text{ es derivación})$

Entonces se dice que $(C^\infty(M), *, \{\cdot, \cdot\})$ es un *álgebra de Poisson* donde $*$ es el producto usual de funciones. La operación $\{\cdot, \cdot\}$ se denomina *corchete de Poisson*.

Las propiedades a) y b) son las que definen un álgebra de Lie mientras que la propiedad c) nos permite identificar $\{f, \cdot\}$ con un campo vectorial, ya que un vector tangente en un punto m es una derivación de las funciones $C^\infty(U)$ donde U es un entorno cualquiera de m .

Proposición 1.1. Sea M una variedad simpléctica, Ω el tensor de Poisson de la Definición 1.4 y $f, g \in C^\infty(M)$ entonces la operación $\{\cdot, \cdot\}$ definida como

$$\{f, g\} = \Omega(df, dg)$$

induce un álgebra de Poisson sobre $C^\infty(M)$.

Demostración. Se comprueba fácilmente la Definición 1.5 □

Se puede comprobar que en la carta elegida en (1.1) el corchete de Poisson se escribe

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial Q^i} \frac{\partial g}{\partial P_i} - \frac{\partial f}{\partial P_i} \frac{\partial g}{\partial Q^i} \quad (1.4)$$

Así podemos reescribir la ecuación (1.3) como

$$X_H = \{\cdot, H\} \quad (1.5)$$

Esta ecuación tiene sentido aunque la variedad diferenciable no sea simpléctica pero el corchete de Poisson se haya definido.

1.1.2. Estructura simpléctica del fibrado cotangente

Veamos ahora como podemos aplicar las definiciones y resultados de la sección anterior en el fibrado cotangente de una variedad.

Tomaremos M como una variedad diferenciable de dimensión N , una carta de dicha variedad tendrá como funciones coordenadas (Q^1, \dots, Q^N) .

Definición 1.6. El *fibrado cotangente* de la variedad diferenciable M se denota T^*M y se define como

$$T^*M = \bigcup_{m \in M} (m \times T_m^*M)$$

¹La derivada de Lie con respecto a X_H de ω se anula.

El fibrado cotangente tiene como coordenadas $(Q^1, \dots, Q^N, P_1, \dots, P_N)$, derivadas a partir de las de M . Estas coordenadas se obtienen escogiendo P_i como la coordenadas en la base de T^*M formada por las 1-formas $\{dQ^i\}_{i=1}^N$ con $dQ^i \left(\frac{\partial}{\partial Q^j} \right) = \delta_{ij}$ con $i, j = 1, \dots, N$.

El fibrado cotangente presenta una forma simpléctica natural mientras que el fibrado tangente no permite la misma construcción. Para verlo necesitamos el siguiente lema preliminar.

Lema 1.2. *Sea M y N dos variedades y sea $F : M \rightarrow N$ una función C^∞ entonces*

1. *Sea $v \in T_m M$ y F_*^m la diferencial de F en el punto m entonces $F_*^m(v) \in T_{F(m)} N$*

$$F_*^m : T_m M \rightarrow T_{F(m)} N$$

F_ define una aplicación $\mathfrak{X}(M) \rightarrow \mathfrak{X}(N)$ ² que llamaremos pushforward.*

2. *Sea $\alpha \in T_{F(m)}^* N$ y F_m^* la codiferencial de F en el punto m entonces $F_m^*(\alpha) \in T_m^* M$*

$$F_m^* : T_{F(m)}^* N \rightarrow T_m^* M$$

F^ define una aplicación entre $\Lambda^1(N) \rightarrow \Lambda^1(M)$ ³ que llamaremos pullback.*

En general no existen las aplicaciones inversas.

Una vez conocido este lema podemos demostrar el resultado central de esta sección.

Teorema 1.3. *Sea T^*M el fibrado cotangente a una variedad M . Este admite una estructura natural de variedad simpléctica cuya forma simpléctica ω es exacta. Esta forma es, tras un cambio de signo⁴, la diferencial exterior de la 1-forma de Liouville θ . Las expresiones de dichas formas en la carta anteriormente descrita son*

$$\theta = \sum_{i=1}^N P_i dQ^i, \quad \omega = \sum_{i=1}^N dQ^i \wedge dP_i. \quad (1.6)$$

Demostración. En el fibrado cotangente T^*M tenemos la proyección natural $\pi : T^*M \rightarrow M$ tomaremos un punto $m \in T^*M$, cuyas funciones coordenadas en una carta son $(Q^1, \dots, Q^N, P_1, \dots, P_N)$. Por el lema anterior la diferencial de π en dicho punto define

$$\pi_*^m : T_m T^*M \rightarrow T_{\pi(m)} M$$

Tenemos que, si escogemos $\xi \in T_m T^*M$, entonces $\pi_*^m(\xi)$ es un vector tangente a la variedad M en el punto $\pi(m) = (Q^1, \dots, Q^N)$ y sobre dicho vector podemos hacer actuar $P = (P_1, \dots, P_N) \in T_m^* M$ y podemos definir

$$\theta^m(\xi) = P(\pi_*^m(\xi)), \quad (1.7)$$

que define una 1-forma sobre T^*M cuya expresión coordenada es $\theta = \sum_{i=1}^N P_i dQ^i$. Esta es la denominada forma de Liouville. Tomando $\omega = -d\theta$ tenemos una 2-forma cerrada y no degenerada, lo que prueba la hipótesis del teorema. \square

Una vez probado este teorema debemos hacer dos observaciones:

- El fibrado tangente a la variedad no admite una estructura simpléctica en todos los casos. Para la demostración del teorema hemos utilizado la parte 1 del Lema 1.2 mientras para una construcción similar necesitaríamos una inversa a la función presentada en la parte 2, que en general no existe.
- Por otra parte el Teorema 1.3 muestra que las cartas que se eligen de manera natural para el fibrado cotangente son las cartas para las cuales la forma simpléctica asociada está en la forma de Darboux descrita en la ecuación (1.1).

² $\mathfrak{X}(M)$ es el espacio de campos vectoriales sobre M .

³ $\Lambda^1(M)$ es el espacio de 1-formas sobre M

⁴El signo se elige por conveniencia.

1.1.3. Mecánica Hamiltoniana

Una vez descrita la naturaleza simpléctica de los fibrados cotangentes podemos dar una descripción completa de la Mecánica Hamiltoniana.

Si las posiciones de un sistema clásico están confinadas en una variedad M podemos considerar el fibrado cotangente $M_C = T^*M$ y su forma simpléctica ω_C , dada por la ecuación (1.6) en las coordenadas naturales del fibrado cotangente.

Una función hamiltoniana $H \in C^\infty(M_C)$ representa la energía del sistema clásico y la evolución de dicho sistema es la curva integral del campo vectorial hamiltoniano asociado a H , definido a partir de la forma simpléctica ω_C , como en la Definición 1.3.

Si dicha curva integral es $\phi_{X_H}(t)$ entonces, por definición de curva integral, $\frac{d}{dt}\phi_{X_H}(t) = X_H(\phi_{X_H}(t))$ y t es interpretado como el parámetro tiempo.

Si $f \in C^\infty(M_C)$ entonces

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\}_{M_C} \quad (1.8)$$

donde $\{\cdot, \cdot\}_{M_C}$ representan los corchetes de Poisson de M_C , escritos en las cartas naturales del fibrado cotangente en la ecuación (1.4).

Podemos ilustrar con el ejemplo del oscilador armónico el desarrollo de este formalismo.

Ejemplo 1.7. Tenemos que $M = \mathbb{R}$ luego $M_C = T^*M \cong \mathbb{R}^2$ y una carta global de dicha variedad es (Q, P) y en dicha carta el hamiltoniano se escribe

$$H = \frac{P^2}{2} + \omega_0^2 \frac{Q^2}{2}.$$

Luego $X_H = P \frac{\partial}{\partial Q} - \omega_0^2 Q \frac{\partial}{\partial P}$. Si reescribimos $\phi_{X_H}(t) = (Q_a(t), P_a(t))$ entonces

$$\dot{Q}_a \frac{\partial}{\partial Q} + \dot{P}_a \frac{\partial}{\partial P} = P_a \frac{\partial}{\partial Q} - \omega_0^2 Q_a \frac{\partial}{\partial P}.$$

Quedando la ecuación diferencial

$$\ddot{Q}_a = -\omega_0^2 Q_a$$

que es la ecuación diferencial del oscilador armónico.

1.2. Formalismo Geométrico de la Mecánica Cuántica

En Mecánica Cuántica, en la formulación de Schrödinger, los estados de un sistema vienen representados por elementos de un espacio de Hilbert separable $(\mathcal{H}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$. Un estado se representa, en la llamada notación de Dirac, con $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Dichos estados evolucionan bajo la acción de un hamiltoniano H , que es un operador lineal autoadjunto $H : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, siguiendo la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\psi(t)\rangle. \quad (1.9)$$

En el caso clásico un observable físico es cualquier función $C^\infty(M_C)$, sin embargo, en el caso cuántico las medidas permitidas son las que se obtienen a partir de un operador autoadjunto A como

$$e_A(|\psi\rangle) = \frac{\langle \psi | A \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad |\psi\rangle \neq 0, \quad (1.10)$$

donde $\langle \psi | \varphi \rangle$ es el producto escalar de los estados $|\psi\rangle$ y $|\varphi\rangle$, y $A|\psi\rangle = |A\psi\rangle$.

Para los propósitos de esta memoria se supondrá que $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ con el producto escalar hermítico canónico y, por tanto, los operadores autoadjuntos y el Hamiltoniano serán matrices hermíticas complejas de tamaño $n \times n$. Para describir la mecánica cuántica sobre variedades debemos echar un vistazo a la estructura de las variedades complejas. Una introducción más exhaustiva a los resultados de esta sección se puede encontrar en [2, 4]

1.2.1. Las propiedades de \mathbb{C}^n como variedad real y las variedades de Kähler

En esta sección se ilustrará la manera de describir una variedad compleja vista como una variedad real con la estructura de Kähler adicional desde el ejemplo de la estructura de variedad de \mathbb{C}^n .

Dada una base de $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, que siguiendo la notación de Dirac será $\{|z_1\rangle, \dots, |z_n\rangle\}$, un vector cualquiera se escribirá en dichas coordenadas como

$$|\varphi\rangle = \sum_{k=1}^n \varphi_k |z_k\rangle. \quad (1.11)$$

Las componentes φ_k son números complejos y por tanto existen únicos $q_k, p_k \in \mathbb{R}$ tal que $\varphi_k = q^k + ip_k$ definiendo una aplicación invertible

$$\iota : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}_{\mathbb{R}}, \quad (\varphi_1, \dots, \varphi_n) \longmapsto (q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n) \quad (1.12)$$

donde $\mathcal{H}_{\mathbb{R}} = \mathbb{R}^{2n}$, que es la realificación del espacio complejo.

Para trasladar las propiedades como espacio de Hilbert de \mathbb{C}^n a \mathbb{R}^{2n} hay que trasladar el producto escalar definido en el primero. Para ello reescribimos, con la aplicación ι

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_{k=1}^n q_k^\psi q_k^\varphi + p_k^\psi p_k^\varphi + i \left(q_k^\psi p_k^\varphi - p_k^\psi q_k^\varphi \right). \quad (1.13)$$

Cuando tratamos \mathbb{R}^{2n} como una variedad diferenciable nos estamos refiriendo a la estructura usual de espacio afín, mientras que el producto escalar está definido sobre la estructura de espacio vectorial. Llamaremos M_Q a $\mathcal{H}_{\mathbb{R}}$ con estructura de variedad. En el lenguaje de las variedades diferenciables, cuando hablamos de producto escalar, nos referimos a una forma hermitica definida en un punto $\iota\psi \in M_Q$ que actúa sobre los vectores del espacio tangente $T_{\iota\psi}M_Q$. La forma hermitica que vamos a definir sobre M_Q se puede escribir gracias a la identificación de \mathbb{R}^{2n} con M_Q y a la vez con $T_{\iota\psi}M_Q$ que permite definir, para cada $\iota\phi \in \mathbb{R}^{2n}$, el campo vectorial

$$X_{\iota(\phi)} : M_Q \rightarrow TM_Q, \quad \iota(\psi) \longmapsto (\iota(\psi), \iota(\phi)). \quad (1.14)$$

Este campo nos permite trasladar la ecuación (1.13) a la expresión

$$\langle \psi | \varphi \rangle = g(X_{\iota(\psi)}, X_{\iota(\varphi)}) + i\omega(X_{\iota(\psi)}, X_{\iota(\varphi)}) \quad (1.15)$$

Donde $g, \omega \in \mathcal{T}_2^0$ son campos (0,2)-tensoriales sobre la variedad M_Q . Además, por las propiedades del producto escalar de \mathbb{C}^n , g es una métrica riemanniana y ω es una forma simpléctica.

La estructura compleja de \mathbb{C}^n debe ser trasladada al lenguaje tensorial para dar sentido a las nociones de sesquilinearidad del producto escalar y para reescribir expresiones en las que la unidad imaginaria esté involucrada.

Definición 1.8. Sea $J \in \mathcal{T}_1^1$ un campo (1,1)-tensorial sobre una variedad M , este se dice *estructura casi compleja* si cumple que para cada $x \in M$,

$$(J_x)^2 = -I_x,$$

con $I_x : T_xM \rightarrow T_xM$ el (1,1)-tensor identidad. Si J es integrable⁵ se dice *estructura compleja*.

Como en nuestro caso M_Q está cubierto por una sola carta, J forma una estructura compleja y se cumple la relación

$$g_Q(X_{\iota\psi}, X_{\iota\varphi}) = \omega_Q(JX_{\iota\psi}, X_{\iota\varphi}) \quad (1.16)$$

De esta manera hemos trasladado las propiedades de \mathbb{C}^n a un lenguaje tensorial sobre \mathbb{R}^{2n} que nos permite generalizar esta estructura a cualquier variedad.

⁵Que este tensor sea integrable significa que el tensor de Nijenhuis de J es el tensor nulo [5]. En este caso implica que la definición de la estructura compleja no dependerá de cada carta.

Definición 1.9. Una *variedad casi de Kähler* es una tupla (M, g, ω, J) con M una variedad diferenciable, g una métrica riemanniana, ω una forma simpléctica y J una estructura casi compleja que cumplen la condición de compatibilidad

$$g(X, Y) = \omega(JX, Y) \quad \forall X, Y \in \mathfrak{X}(M). \quad (1.17)$$

Si J es una estructura compleja entonces (M, g, ω, J) es una *variedad de Kähler*

En el caso de \mathbb{C}^n la aplicación ι definida en (1.12) nos define una carta de la variedad de Kähler M_Q en la que podemos escribir los tensores que definen la variedad

$$g_Q = \sum_{k=1}^n dq^k \otimes dq^k + dp_k \otimes dp_k, \quad \omega_Q = \sum_{k=1}^n dq^k \wedge dp_k, \quad J_Q = \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial p_k} \otimes dq^k - dp_k \otimes \frac{\partial}{\partial q^k}. \quad (1.18)$$

Como podemos comprobar, la forma simpléctica en esta carta está en la forma de Darboux descrita en (1.1).

1.2.2. La ecuación de Schrödinger en formulación tensorial

El espacio de estados \mathcal{H} visto como variedad tiene estructura de variedad de Kähler, y por tanto tiene una forma simpléctica asociada ω_C . Sobre esta estructura vamos a realizar una construcción similar a la llevada a cabo en la Subsección 1.1.3 con la Mecánica Clásica para ver que podemos reproducir de esta manera la ecuación de Schrödinger. La construcción en Mecánica Clásica se basa en una función hamiltoniana de clase $C^\infty(M_C)$, sin embargo, en mecánica cuántica las funciones físicamente relevantes son del tipo (1.10). Para lidiar con estas funciones dividiremos en dos partes la discusión, en este apartado discutiremos las formas sesquilineales sobre M_Q que es el conjunto

$$\mathcal{F}_{\mathbb{R}}(M_Q) = \left\{ f_A = \langle \psi | A \psi \rangle \text{ t.q. } |\psi\rangle \in \mathcal{H}, A \in \text{End}(\mathcal{H}), A^\dagger = A \right\} \quad (1.19)$$

Donde $\text{End}(\mathcal{H})$ son los endomorfismos del espacio de Hilbert \mathcal{H} . El denominador de (1.10) se puede discutir en términos del espacio proyectivo de \mathcal{H} y será la materia de discusión en la siguiente subsección.

Es conocido en mecánica cuántica que el hamiltoniano H debe ser un operador autoadjunto $H^\dagger = H$. Así $\mathcal{F}_{\mathbb{R}}(M_Q)$ forma un espacio vectorial real de funciones de valor real. Para considerar un campo hamiltoniano como en (1.2) podemos tomar la función f_H y considerar, partiendo de la forma simpléctica ω_Q de la estructura de Kähler

$$X_H = \hbar^{-1} \Omega_Q(\cdot, df_H), \quad (1.20)$$

donde Ω_Q es el tensor de Poisson (1.3). Un cálculo sencillo, desarrollado en [2], nos muestra que las curvas integrales de X_H son las soluciones de la ecuación de Schrödinger (1.9) cuando se reescribe en una carta de la variedad M_Q .

El tensor de Poisson Ω_Q define sobre $\mathcal{F}_{\mathbb{R}}(M_Q)$ un álgebra de Poisson. Por su parte, podemos considerar una versión contravariante de la forma g , que denotaremos G e introducir de manera análoga a la Proposición 1.1 un álgebra sobre $\mathcal{F}_{\mathbb{R}}(M_Q)$. Sobre la carta en la que está escrito (1.18) estos tensores toman la forma

$$\Omega_Q = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial q^i} \wedge \frac{\partial}{\partial p_i}, \quad G_Q = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial q^i} \otimes \frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{\partial}{\partial p_i} \otimes \frac{\partial}{\partial p_i}. \quad (1.21)$$

Con un cálculo explícito en esta carta se demuestra

Lema 1.4. Sea Ω_Q el tensor de Poisson y G_Q el tensor métrico contravariante, definidos anteriormente, sean $f_A, f_B \in \mathcal{F}_{\mathbb{R}}(M_Q)$ definidos como en (1.19), entonces

$$G_Q(df_A, df_B) = \{f_A, f_B\}_{Q+} = f_{[A, B]_+}, \quad \Omega_Q(df_A, df_B) = \{f_A, f_B\}_Q = f_{[A, B]}. \quad (1.22)$$

Las operaciones $[\cdot, \cdot]_+$ y $[\cdot, \cdot]$ son operaciones internas a los operadores autoadjuntos de \mathcal{H} y se definen como

$$[A, B]_+ = AB + BA \quad [A, B] = -i(AB - BA) \quad \forall A, B \in \text{Autoadj}(\mathcal{H}).$$

Gracias a este lema podemos codificar la estructura algebraica de $\text{Autoadj}(\mathcal{H})$ en una formulación tensorial. Esto es importante a la hora de presentar la mecánica cuántica desde la imagen de Heisenberg que es otra de las formas de presentar la teoría cuántica desde el punto de vista de los operadores.

1.2.3. El espacio proyectivo $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$ como variedad \mathcal{P}

En la ecuación (1.10) podemos ver que los observables de un sistema físico dan el mismo resultado para distintos estados. Si consideramos $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \setminus \{0\} = \hat{\mathcal{H}}$ completo, cualquier $\rho e^{i\theta} |\psi\rangle$ con $\rho > 0$ da el mismo valor. El nuevo espacio de funciones que utilizaremos es

$$\mathcal{F}_{\mathcal{O}}(\hat{M}_Q) = \left\{ e_A = \frac{\langle \psi | A \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \text{ t.q. } |\psi\rangle \in \mathcal{H}, A \in \text{Herm}(\mathcal{H}) \right\}. \quad (1.23)$$

Para evitar que el espacio de estados tenga información redundante hay que eliminar estos estados. La manera de llevarlo a cabo es introduciendo una relación de equivalencia \mathcal{R} en \hat{M}_Q ⁶ que exprese esta condición. Para ello introducimos los campos vectoriales

$$\Delta = \sum_{k=1}^n q^k \frac{\partial}{\partial q^k} + p_k \frac{\partial}{\partial p_k}, \quad \Gamma = \sum_{k=1}^n p_k \frac{\partial}{\partial q^k} - q^k \frac{\partial}{\partial p_k}; \quad \Delta = \sum_{k=1}^n \rho_k \frac{\partial}{\partial \rho_k}, \quad \Gamma = \sum_{k=1}^n \theta_k \frac{\partial}{\partial \theta_k}. \quad (1.24)$$

En las segundas expresiones se han tomado coordenadas polares $q^k + ip_k = \rho_k e^{i\theta_k}$. Podemos definir la relación de equivalencia

$$x, y \in M_Q, x \mathcal{R} y \iff \begin{array}{l} x \text{ e } y \text{ pertenecen a la misma órbita generada} \\ \text{por la acción de algún } X \in \mathbb{R} \langle \Delta, \Gamma \rangle \text{ sobre } \hat{M}_Q. \end{array} \quad (1.25)$$

Esta relación de equivalencia es la descrita al inicio de esta subsección, $|\psi\rangle \sim \rho e^{i\theta} |\psi\rangle$, $\rho > 0$, el conjunto de funciones $\mathcal{F}_{\mathcal{O}}(\hat{M}_Q)$ es constante sobre las curvas integrales de Δ y Γ . Como $[\Delta, \Gamma] = 0$ la distribución $\{\Delta, \Gamma\}$ es integrable y define una foliación de \hat{M}_Q y el conjunto \hat{M}_Q/\mathcal{R} tiene estructura de variedad cociente. Este conjunto es difeomorfo al espacio proyectivo complejo $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$ al que denotaremos \mathcal{P} al referirnos a su estructura de variedad cociente. Podemos definir la proyección canónica

$$\pi : \hat{M}_Q \rightarrow \mathcal{P}, \quad |\psi\rangle \mapsto [\psi] \quad (1.26)$$

donde $[\psi]$ es la clase de equivalencia definida por \mathcal{R} . Esta aplicación define una submersión de variedades y debido al Lema 1.2 la estructura de Kähler no se puede proyectar directamente. En su lugar trataremos de proyectar los tensores contravariantes (1.21). Para poder llevar a cabo esta operación dichos tensores deben ser constantes sobre las fibras de $[\psi]$ ⁷, para ello el tensor debe ser constante bajo las curvas integrales definidas por Δ y Γ , es decir, la derivada de Lie sobre estos campos se debe anular, sin embargo

$$\mathcal{L}_{\Delta} G = -2G, \quad \mathcal{L}_{\Delta} \Omega = -2\Omega, \quad \mathcal{L}_{\Gamma} G = 0, \quad \mathcal{L}_{\Gamma} \Omega = 0. \quad (1.27)$$

⁶ \hat{M}_Q denota la estructura de variedad de $\hat{\mathcal{H}}$. Esta variedad se puede definir con la carta dada por ι de (1.12) y la estructura de Kähler no varía ya que se define localmente.

⁷ Esto es $\pi^{-1}([\psi])$.

Para evitar esto se consideran unos tensores normalizados que tengan derivada de Lie nula

$$\tilde{G} = \|\psi\|^2 G - \Delta \otimes \Delta - \Gamma \otimes \Gamma \quad \tilde{\Omega} = \|\psi\|^2 \Omega - \Delta \otimes \Gamma + \Gamma \otimes \Delta, \quad (1.28)$$

donde los sumandos se añaden para que $\tilde{G}(\alpha, \cdot)$ y $\tilde{\Omega}(\alpha, \cdot)$ estén en el espacio generado por $G(de_A, \cdot)$ y $\Omega(de_A, \cdot)$ respectivamente con $\alpha \in \Lambda^1(\hat{M}_Q)$ y $A \in \text{Herm}(\mathcal{H})$ cualquiera, para una discusión detallada ver [4] Sección 1.3.

Con esta definición $G_{\mathcal{P}} = \pi_*(\tilde{G})$ y $\Omega_{\mathcal{P}} = \pi_*(\tilde{\Omega})$ definen un tensor métrico contravariante y un tensor de Poisson sobre \mathcal{P} . Ambos son no degenerados sobre \mathcal{P} por lo que se puede definir, de manera inversa a (1.21), los tensores covariantes $\omega_{\mathcal{P}}$ y $g_{\mathcal{P}}$. Añadiendo el tensor $J_{\mathcal{P}}$ que cumple la Definición 1.8. La variedad \mathcal{P} es una variedad casi de Kähler.

La esfera de Bloch, el sistema de dos niveles.

Ejemplo 1.10. [2] En un sistema de dos niveles ⁸ \hat{M}_Q representa a la estructura de variedad de $\hat{\mathcal{C}}^2$. Este sistema está generado por dos estados ortonormales $|0\rangle$ y $|1\rangle$ de manera que cualquier otro estado se escribe

$$|\psi\rangle = (q^1 + ip_1)|1\rangle + (q^2 + ip_2)|0\rangle$$

Se puede comprobar que $|\psi\rangle$ viene completamente determinado por $e_{\sigma_x}, e_{\sigma_y}$ y e_{σ_z} donde en base $\{|1\rangle, |0\rangle\}$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.29)$$

Así podemos definir unas coordenadas cartesianas $x = e_{\sigma_x}(|\psi\rangle)$, $y = e_{\sigma_y}(|\psi\rangle)$ y $z = e_{\sigma_z}(|\psi\rangle)$

$$x = 2 \frac{q^1 q^2 + p_1 p_2}{(q^1)^2 + (q^2)^2 + p_1^2 + p_2^2}, \quad y = 2 \frac{q^1 p_2 - q^2 p_1}{(q^1)^2 + (q^2)^2 + p_1^2 + p_2^2}, \quad z = \frac{(q^1)^2 + p_1^2 - (q^2)^2 - p_2^2}{(q^1)^2 + (q^2)^2 + p_1^2 + p_2^2} \quad (1.30)$$

de manera que $x^2 + y^2 + z^2 = 1$. Estas coordenadas establecen una relación biyectiva entre la recta compleja $C\mathbb{P}^1$ y $S^2 \subset \mathbb{R}^3$, la esfera de radio 1 centrada en 0. Esta biyección es además un difeomorfismo de variedades.

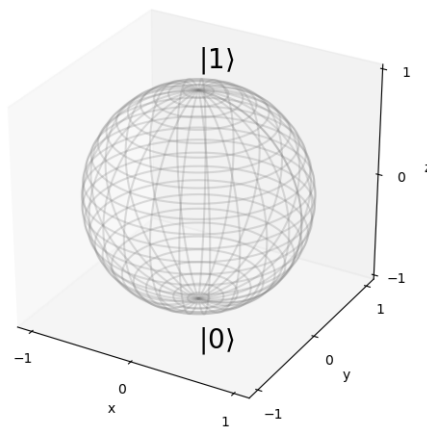


Figura 1.1: Esfera de Bloch, esta esfera representa la recta proyectiva compleja $C\mathbb{P}^1$

Esta es la manera habitual de presentar la recta proyectiva compleja en el contexto de la mecánica cuántica. Esta visión da además una interpretación física en función del *spin*.

⁸Este sistema también se denomina *qubit* por el nombre que recibe en computación cuántica.

1.3. El formalismo híbrido

Con la descripción geométrica de la Mecánica Clásica, Subsección 1.1.3, y la descripción geométrica de la Mecánica Cuántica, Sección 1.2, en términos de variedades simplécticas podemos explotar las similitudes formales que en ambas aparecen para definir un formalismo en el que trabajar de manera natural con sistemas en los que parte de la descripción es cuántica y otra parte es clásica. Un ejemplo habitual son los modelos de moléculas semiclásicos en los que los núcleos y los electrones internos se modelizan como un sistema clásico para simplificar la resolución del modelo y los electrones externos, relevantes para los enlaces químicos, se modelizan como un sistema cuántico.

Para construir este modelo tomaremos la variedad clásica M_C y la variedad cuántica M_Q o \mathcal{P} , y consideraremos el espacio de estados generalizado como $\mathcal{S} = M_C \times M_Q$. Se puede comprobar fácilmente que sobre \mathcal{S} se puede definir una forma simpléctica con ayuda de las proyecciones canónicas $\pi_1 : M_C \times M_Q \rightarrow M_Q$ y $\pi_2 : M_C \times M_Q \rightarrow M_C$ y el *pullback* definido por la parte 2 del Lema 1.2. Esta forma es

$$\omega_{\mathcal{S}} = \pi_1^*(\omega_C) + \hbar\pi_2^*(\omega_Q). \quad (1.31)$$

Por otra parte, si tomamos $\Gamma_Q = \mathbb{I} \otimes \Gamma$, con la definición de (1.24), el espacio de funciones serán los observables generalizados \mathcal{O} , definidos como

$$\mathcal{O} = \{f \in C^\infty(M_C \times M_Q) \mid \Gamma_Q f = 0\}. \quad (1.32)$$

Esta elección se hace porque se pierde la linealidad de la parte cuántica al considerar el acoplo con la parte clásica. Esto se muestra en [4] Capítulo 5 explícitamente. Sobre estos observables se puede definir un álgebra de Poisson a partir del tensor $\omega_{\mathcal{S}}$. El corchete de Poisson que se obtiene es

$$\{\cdot, \cdot\}_{\mathcal{S}} = \{\cdot, \cdot\}_C + \hbar^{-1} \{\cdot, \cdot\}_Q \quad (1.33)$$

La dinámica de estos sistemas se puede definir como las curvas integrales de los campos hamiltonianos $f \in \mathcal{O}$

$$X_f = \{\cdot, f\}_{\mathcal{S}} = \{\cdot, f\}_C + \hbar^{-1} \{\cdot, f\}_Q. \quad (1.34)$$

Si consideramos el hamiltoniano como una función de la forma

$$f_H(\mathbf{R}, \mathbf{P}, \mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{j=1}^N \frac{P_j^2}{2M_j} + \langle \psi(\mathbf{q}, \mathbf{p}) | H_e(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \rangle$$

con $\mathbf{R} = (Q^1, \dots, Q^N)$, \mathbf{P}, \mathbf{p} y \mathbf{q} cantidades de tipo vectorial, la dinámica anteriormente descrita recupera la dinámica del modelo semiclásico de Ehrenfest [2, 4]. Las ecuaciones del modelo de Ehrenfest son

$$\begin{aligned} \frac{dQ^j}{dt}(t) &= \frac{1}{M_j} P_j(t), \\ \frac{dP_j}{dt}(t) &= -\frac{\partial}{\partial Q^j} \langle \psi(t) | H_e(\mathbf{R}(t)) \psi(t) \rangle, \\ i \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} &= H_e(\mathbf{R}(t)) |\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

para $j = 1, \dots, N$.

Capítulo 2

Control de los Sistemas Híbridos

Bajo el formalismo geométrico descrito en la Sección 1.3 cabe estudiar los aspectos relacionados con la teoría de control. Los aspectos generales de esta teoría se pueden consultar en [3]. El desarrollo de la teoría de control para sistemas híbridos tiene potenciales aplicaciones en distintos ámbitos de las ciencias experimentales. Entre ellos está el control de reacciones químicas o el control de la evolución de sistemas biológicos.

Los sistemas de control que consideraremos son los sistemas de control afín definidos sobre una variedad diferenciable M . Se discutirán problemas del tipo

$$(P.C.) = \begin{cases} \dot{x}(t) &= X_0(x) + \sum_{k=1}^m u_k(t)X_k(x) \\ x(0) &= x_i \\ x(t_f) &= x_f \end{cases} \quad \text{Con } x_i, x_f \in M, t_f \in \mathbb{R}, \quad (2.1)$$

donde las incógnitas son $u_i(t)$ $i = 1, \dots, m$. Estas son funciones reales llamadas funciones de control. $X_0 \in \mathfrak{X}(M)$ es el llamado campo vectorial de *drift*, $X_i \in \mathfrak{X}(M)$ $i = 1, \dots, m$ son linealmente independientes y se llaman campos de control. La versión (P.C.) más usual es la que no especifica t_f o especifica $t_f \leq T$ para algún T .

En el caso de los sistemas híbridos la variedad considerada es $\mathcal{S} = M_C \times M_Q$ (o \mathcal{P} como subvariedad cuántica) y la dinámica es una curva integral de (1.34). En adelante se consideraran las unidades naturales $\hbar = 1$. Para obtener problemas de control afín debemos considerar funciones hamiltonianas de la forma

$$H(\mathbf{Q}, \mathbf{P}, \mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{u}) = H_0 + \sum_{i=1}^m u_i H_i. \quad (2.2)$$

A estos hamiltonianos los llamaremos hamiltonianos de control. Nuestro objetivo es buscar condiciones sobre estas funciones para que existan soluciones a (P.C.).

2.1. Conjuntos alcanzables y Teoremas de controlabilidad.

Podemos discutir la existencia de solución del problema (2.1) en función de objetos llamados conjuntos alcanzables. Estudiaremos el sistema de ecuaciones diferenciales sobre la variedad M

$$\dot{x}(t) = X_0(x) + \sum_{k=1}^m u_k(t)X_k(x), \quad \mathbf{u} : \mathbb{R}^+ \rightarrow U \subset \mathbb{R}^m, \mathbf{u} = (u_1, \dots, u_m) \quad (2.3)$$

con los campos vectoriales como en (2.1) y donde U es el llamado conjunto de controles admisibles. En adelante supondremos que los campos de control y el *drift* son campos vectoriales completos.

¹Las letras en negrita indican cantidades de tipo vectorial.

Definición 2.1. El conjunto alcanzable $\mathcal{A}(x_i, T)$ de un punto $x_i \in M$ en un tiempo $T > 0$, para el sistema (2.3) es el conjunto de puntos $x_a \in M$ tales que, para alguna función de control $\mathbf{u}(t)$ la curva integral $x(t)$ cumple $x(0) = x_i$ y $x(T) = x_a$.

- Se define el conjunto alcanzable de un punto $x_i \in M$ a un tiempo menor o igual que T como

$$\mathcal{A}(x_i, \leq T) = \bigcup_{0 < t \leq T} \mathcal{A}(x_i, t)$$

- Se define el conjunto alcanzable de un punto $x_i \in M$ como

$$\mathcal{A}(x_i) = \lim_{T \rightarrow \infty} \mathcal{A}(x_i, \leq T)$$

La existencia de soluciones al problema (2.1) en sus distintas versiones se puede expresar como que sus conjuntos alcanzables cumplan una de las siguientes definiciones.

Definición 2.2. Varias nociones de controlabilidad se pueden dar con arreglo a los distintos tipos de conjunto alcanzable. Un sistema como el de (2.3) se dice:

- *Fuertemente controlable* si $\forall x \in M$ se tiene $\mathcal{A}(x, \leq T) = M$, $\forall T > 0$
- *Controlable* si $\forall x \in M$ se tiene $\mathcal{A}(x) = M$
- *Controlable a tiempo exacto* si $\forall x \in M$ se tiene $\mathcal{A}(x, T) = M$, $\forall T > 0$

Por último, en $\mathfrak{X}(M)$ se puede introducir un corchete de Lie gracias a la naturaleza de derivación de sus elementos sobre $C^\infty(M)$. Este corchete es el conmutador que se define como

$$[X, Y](f) = X(Y(f)) - Y(X(f)), \quad X, Y \in \mathfrak{X}(M), \quad \forall f \in C^\infty(M). \quad (2.4)$$

Un resultado conocido en la literatura es que las curvas integrales de $\mathfrak{X}(M)$ definen sobre M el grupo de difeomorfismos dependientes de un parámetro [5]. Gracias a este resultado conocer el álgebra de Lie generada por los campos de (2.3) nos ofrecerá información adicional sobre la controlabilidad de dicho sistema si el grupo generado por dicho álgebra es un grupo que actúa transitivamente sobre la variedad M . Denotaremos *Lie* $\{X_1, \dots, X_k\}$ al espacio vectorial generado por los conmutadores sucesivos de los campos X_1, \dots, X_k .

Teorema 2.1. [3](Para sistemas de control afín) Para el sistema (2.3) con el conjunto de controles admisibles sin restricciones, $U = \mathbb{R}^m$, si los campos de control generan el espacio tangente en cada punto, *Lie* $\{X_1, \dots, X_m\} = T_x M$ para todo $x \in M$, entonces el sistema es fuertemente controlable y, por tanto, controlable.

Teorema 2.2. [3](Para sistemas de control afín) Para el sistema (2.3), si se cumplen las condiciones del teorema anterior y el grupo fundamental de la variedad M no tiene elementos de orden infinito entonces el sistema es controlable a tiempo exacto.

Estos teoremas dan condiciones suficientes para la controlabilidad de los sistemas que consideraremos más adelante. Los teoremas anteriores no son generalizables para conjuntos U cualesquiera, sin embargo asegurando que $(0, \dots, 0) \in U$ e imponiendo condiciones adicionales sobre el término de *drift*, que se cumplen para un gran número de casos de interés en física, la condición *Lie* $\{X_0, X_1, \dots, X_m\} = T_x M$ para todo $x \in M$ asegura la controlabilidad del sistema. Para ampliar ver [3] y para ejemplos de controlabilidad en Física usando este criterio [6, 7]

2.2. Condiciones suficientes para el control de Sistemas Híbridos

Buscaremos en esta sección condiciones suficientes para la controlabilidad de sistemas híbridos de la manera más general posible y con el menor número de controles. Para ello consideraremos hamiltonianos de control del tipo

$$H = H_d + \sum_{j=1}^k u_j f_j(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) e_{A_j}(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (2.5)$$

Estos hamiltonianos están definidos sobre $\mathcal{S} = M_C \times M_Q$, sin embargo la variedad $M_Q = \mathbb{C}^n$ es demasiado grande para ser considerada completa. Las características de la dinámica del sistema aseguran que la norma de los estados cuánticos se preservará, luego podemos considerar $M_Q \rightarrow S_{\mathbb{C}}^{n-1}$ la esfera compleja de dimensión $n - 1$. En la Subsección 1.2.3 hemos realizado la discusión de los sistemas cuánticos en el espacio \mathcal{P} , el proyectivo de dimensión $n - 1$. En este espacio también se pueden considerar los problemas de control. Notar que en ambos casos se pasa a trabajar en un espacio de estados compacto para la parte cuántica. La elección de cada espacio dependerá de en qué formalismo de la mecánica cuántica se esté trabajando.

Los campos vectoriales involucrados en el sistema de control son

$$\begin{aligned} X_0 &= \{\cdot, H_d\}_{\mathcal{S}}, \\ X_{\rho_1} &= \{\cdot, f_1 e_{A_1}\}_{\mathcal{S}} = f_1 \{\cdot, e_{A_1}\}_{M_Q} + e_{A_1} \{\cdot, f_1\}_{M_C}, \\ &\dots \\ X_{\rho_k} &= \{\cdot, f_k e_{A_k}\}_{\mathcal{S}} = f_k \{\cdot, e_{A_k}\}_{M_Q} + e_{A_k} \{\cdot, f_k\}_{M_C}. \end{aligned} \quad (2.6) \quad x(t) = \begin{pmatrix} Q_1(t) \\ P_1(t) \\ \vdots \\ Q_N(t) \\ P_N(t) \\ q_1(t) \\ p_1(t) \\ \vdots \\ q_n(t) \\ p_n(t) \end{pmatrix}$$

Las curvas integrales $x(t)$ cumplen la ecuación

$$\dot{x}(t) = X_0(x) + \sum_{j=1}^k u_j(t) X_{\rho_j}(x). \quad (2.7)$$

Debido a que toda la información del sistema está codificada en la función hamiltoniana (2.5) debemos poder realizar el estudio de la controlabilidad atendiendo solo a las funciones que allí aparezcan. Para ver la controlabilidad de esta manera será útil la aplicación Ξ_M definida a continuación. Consideremos $\gamma_1, \dots, \gamma_k \in C^\infty(M)$ para alguna variedad de Poisson $(M, \{\cdot, \cdot\}_M)$. Denotaremos al álgebra de Poisson generada por $\gamma_1, \dots, \gamma_k$ como $\mathfrak{P}\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}_M \subseteq C^\infty(M)$. Consideremos la aplicación

$$\Xi_M : \mathfrak{P}\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\} \rightarrow \mathfrak{X}(M), \quad h \longmapsto \Xi_M(h) = \{\cdot, h\}_M. \quad (2.8)$$

Teorema 2.3. *La aplicación Ξ_M es un isomorfismo de álgebras de Lie entre $\mathfrak{P}\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}$ y $\text{Lie}\{Y_{\gamma_1}, \dots, Y_{\gamma_k}\}$ para $Y_{\gamma_1} = \Xi_M(\gamma_1), \dots, Y_{\gamma_k} = \Xi_M(\gamma_k)$ siempre que $\gamma_1, \dots, \gamma_k, c$ con c una función constante, sean funciones linealmente independientes.*

Demostración. Consideremos $[Y_{\gamma_i}, Y_{\gamma_j}](\gamma)$ con $\gamma \in C^\infty(M)$ cualquiera. Por la identidad de Jacobi

$$[Y_{\gamma_i}, Y_{\gamma_j}](\gamma) = \{\{\gamma, \gamma_i\}, \gamma_j\}_M - \{\{\gamma, \gamma_j\}, \gamma_i\}_M = \{\gamma, \{\gamma_i, \gamma_j\}\}_M \quad \forall i, j = 1, \dots, k$$

Como Ξ_M es lineal y se cumple la relación anterior se puede comprobar que $\text{Im}(\Xi_M) = \text{Lie}\{Y_{\gamma_1}, \dots, Y_{\gamma_k}\}$ y que es un homomorfismo de álgebras de Lie. Notar que por $\text{Lie}\{Y_{\gamma_1}, \dots, Y_{\gamma_k}\}$ nos referimos a la estructura de espacio vectorial real y no a la estructura de módulo que se

puede introducir considerando el anillo de funciones $C^\infty(M)$. Este espacio vectorial, en general, es de dimensión infinita.

Definiremos un homomorfismo de álgebras de Lie $\mathcal{F}_{\{\gamma_i\}} : Lie\{Y_{\gamma_1}, \dots, Y_{\gamma_k}\} \rightarrow \mathfrak{P}\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}_M$, de manera que $\forall Z_1, Z_2 \in Lie\{Y_{\gamma_1}, \dots, Y_{\gamma_k}\}$ y $\forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\{\gamma_i\}} : Y_{\gamma_1} &\longmapsto \gamma_1 & \mathcal{F}_{\{\gamma_i\}}([Z_1, Z_2]) &= \{\mathcal{F}_{\{\gamma_i\}}(Z_1), \mathcal{F}_{\{\gamma_i\}}(Z_2)\}_M, \\ &\dots & & \\ Y_{\gamma_k} &\longmapsto \gamma_k & \mathcal{F}_{\{\gamma_i\}}(\lambda_1 Z_1 + \lambda_2 Z_2) &= \lambda_1 \mathcal{F}_{\{\gamma_i\}}(Z_1) + \lambda_2 \mathcal{F}_{\{\gamma_i\}}(Z_2). \end{aligned} \quad (2.9)$$

La aplicación está bien definida siempre que $\gamma_1, \dots, \gamma_k, c$ con c una función constante, sean funciones linealmente independientes². Entonces para cualquier $Z \in Lie\{Y_1, \dots, Y_k\}$ y para cualquier $h \in \mathfrak{P}\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}_M$ se tiene

$$\begin{aligned} Z &= \{\cdot, F_{\{\gamma_i\}}(Z)\} = \Xi_S(F_{\{\gamma_i\}}(Y)) \\ h &= F_{\{\gamma_i\}}(\{\cdot, h\}) = F_{\{\gamma_i\}}(\Xi_S(h)). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Por tanto Ξ_S es un isomorfismo de álgebras de Lie. \square

Este teorema indica que podemos estudiar $Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\}$ de (2.6) estudiando $\mathfrak{P}\left\{\{e_{A_i} f_i\}_{i=1}^k\right\}$.

2.2.1. Controlabilidad clásico-híbrida y cuántico-híbrida.

Si consideramos las proyecciones naturales $\pi_C : M_C \times M_Q \rightarrow M_C$ y $\pi_Q : M_C \times M_Q \rightarrow M_Q$ sobre la curva $x(t)$ que cumple (2.7) obtenemos los sistemas reducidos clásico $x_C(t) = \pi_C(x(t))$ y cuántico $x_Q(t) = \pi_Q(x(t))$ que en general cumplen ecuaciones del tipo

$$\dot{x}_C(t) = \{\cdot, H_0(x_C, x_Q)\}_{M_C} + \sum_{j=1}^k e_{A_j}(x_Q) \{\cdot, f_j(x_C)\}_{M_C}. \quad (2.11)$$

Definición 2.3. Diremos que un sistema híbrido es *fuertemente controlable clásico*, *controlable clásico* o *controlable clásico a tiempo exacto* cuando el sistema de (2.11) sea fuertemente controlable, controlable o controlable a tiempo exacto respectivamente. Análogamente se pueden definir las nociones de control cuántico para sistemas híbridos.

El sistema (2.11) no es, en general, un sistema de control afín por lo que los teoremas de la sección anterior no son aplicables en este caso. Un caso particular es el siguiente.

Ejemplo 2.4. Tomemos un sistema de control como el descrito en (2.5), supongamos que $H_d = E_C(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) + e_{H_Q}$, que $\Xi_{M_c}(\mathfrak{P}\{f_1, \dots, f_k\}_{M_C}) = T_m M_C \forall m \in M_C$ y que $e_{A_1}, \dots, e_{A_k} \neq 0$ con $\{A_1, \dots, A_k, H_Q\}$ formando un álgebra abeliana.

Con estas hipótesis se puede demostrar que $\frac{de_{A_1}}{dt} = \dots = \frac{de_{A_k}}{dt} = 0$, por tanto e_{A_1}, \dots, e_{A_k} son constantes para (2.11) y el sistema reducido clásico es un sistema de control afín. El sistema es fuertemente controlable clásico consecuencia del Teorema 2.3 y el Teorema 2.1.

Este es un caso particular que no admite generalización sencilla, sin embargo la condición $\Xi_{M_c}(\mathfrak{P}\{f_1, \dots, f_k\}_{M_C}) = T_m M_C$ será una condición necesaria para que se cumpla el criterio de control del Teorema 2.1 en el caso híbrido, debido al siguiente resultado.

Consideremos la proyección $\pi_{m_q} : \mathcal{S} \rightarrow M_C \times \{m_q\}$ de manera que si ϕ_{m_q} es la aplicación que evalúa las funciones de M_Q en el punto m_q tenemos que $\pi_{m_q} = \pi_C \circ \phi_{m_q}$.

² $\mathcal{F}_{\gamma, (\gamma+c)}$ no define aplicación para $\gamma \in C^\infty(M)$

Teorema 2.4. Sean $X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}$ campos vectoriales de un sistema de control sobre $\mathcal{S} = M_C \times M_Q$ como los descritos en (2.6). Supongamos que e_{A_1}, \dots, e_{A_k} no se anulan en $m_q \in M_Q$. Con la proyección $\pi_{m_q} : \mathcal{S} \rightarrow M_C \times \{m_q\}$, para cada $m_c \in M_C$ se tiene

$$\Xi_{M_C} \left(\mathfrak{P} \{f_1, \dots, f_k\}_{M_C} \right) \Big|_{m_c} = \pi_*^{m_q} \left(\text{Lie} \{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\} \right) \Big|_{m_c}$$

donde $\pi_*^{m_q}$ es el pushforward de la proyección π_{m_q} definido en el Lema 1.2.

Para dar la demostración necesitamos una definición preliminar.

Definición 2.5. Sean $C = \{X_1, \dots, X_{\rho_k}\}$ campos vectoriales linealmente independientes sobre M , sea $(\Omega(C), [\cdot, \cdot])$ el conjunto de campos vectoriales cerrado por conmutación y generado por C . Diremos que $Z \in \Omega(C)$ tiene grado de conmutación n , y se indicará $n \in \text{com}(Z)$, si existen dos campos $Y_1, Y_2 \in \Omega(C)$ de manera que $Z = [Y_1, Y_2]$ y $\exists m_1 \in \text{com}(Y_1), m_2 \in \text{com}(Y_2)$ tales que $n = m_1 + m_2 + 1$ y se tiene $0 \in \text{com}(X_j)$ para $j = 1, \dots, k$. Análogamente se define el grado de conmutación para $(\mathcal{O}(\{f_1, \dots, f_n\}_{\mathcal{S}}), \{\cdot, \cdot\}_{\mathcal{S}})$

Un ejemplo para grado de conmutación 5 es $[[X_1, X_2], [X_2, [X_1, X_2]]]$.

A continuación se dará la prueba al teorema anteriormente enunciado, las ideas básicas de la demostración se muestran con un ejemplo en el Apéndice A. En este se calculan los primeros pasos de la inducción.

Demostración. (Del Teorema 2.4) Sea $\rho_i = f_i e_{A_i}$ entonces $X_{\rho_i} = \Xi_{\mathcal{S}}(\rho_i) \forall i = 1, \dots, k$. Consideremos las aplicaciones $\mathcal{F}_{\{\rho_i\}}$, de la demostración del Teorema 2.3 y $\mathcal{G}_{\{f_i\}} : \text{Lie}\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\} \rightarrow \mathfrak{P}\{f_1, \dots, f_k\}_{\mathcal{S}}$, de manera que $\forall Z_1, Z_2 \in \text{Lie}\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\}$ y $\forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\{f_i\}} : X_{\rho_1} &\longmapsto f_1 & \mathcal{G}_{\{f_i\}}([Z_1, Z_2]) &= \{\mathcal{G}_{\{f_i\}}(Z_1), \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Z_2)\}_{\mathcal{S}}, \\ &\dots & & \\ X_{\rho_k} &\longmapsto f_k & \mathcal{G}_{\{f_i\}}(\lambda_1 Z_1 + \lambda_2 Z_2) &= \lambda_1 \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Z_1) + \lambda_2 \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Z_2). \end{aligned} \tag{2.12}$$

Esta aplicación está bien definida ya que la operación equivale a considerar $e_{A_j} = 1$, $j = 1, \dots, k$ constantes y aplicar $\mathcal{F}_{\{f_i\}}$. Además $X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}$ son linealmente independientes por ser campos de control. Por esta razón $\mathcal{F}_{\{\rho_i\}}$ es un isomorfismo de álgebras de Lie como se ve en la demostración del Teorema 2.3. Análogamente se puede considerar la aplicación $\mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}$ que es equivalente a considerar el sistema con $f_j = 1$, $j = 1, \dots, k$ constantes y aplicar $\mathcal{F}_{\{e_{A_i}\}}$.

Con las definiciones de la Definición 2.5 estudiaremos el conjunto de campos

$$\Omega_n = \{Y \mid Y \in \Omega(X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}) \text{ con } n \in \text{com}(Y)\}.$$

Consideremos $\mathcal{Q}_n \subseteq \mathcal{O}(e_{A_1}, \dots, e_{A_k})$ y $\mathcal{C}_n \subseteq \mathcal{O}(f_1, \dots, f_k)$ definidos como

$$\mathcal{Q}_n = \bigcup_{i=0}^n \mathcal{G}_{\{e_{A_j}\}}(\Omega_i), \quad \mathcal{C}_n = \bigcup_{i=0}^n \mathcal{G}_{\{f_j\}}(\Omega_i).$$

Notar que $\mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}$ y $\mathcal{G}_{\{f_i\}}$ son aplicaciones sobreyectivas luego \mathcal{Q}_n y \mathcal{C}_n son las funciones con hasta grado n de conmutación generadas por e_{A_1}, \dots, e_{A_k} y f_1, \dots, f_k respectivamente. Denotaremos $P[\mathcal{C}_n, \mathcal{Q}_m]$ a los polinomios de coeficientes reales que tienen como variables los elementos de los conjuntos anteriormente descritos. Entonces dado $Y \in \Omega_n$ para algunos $l_i \in \mathbb{N}$ con $i = 1, \dots, k$ y $R_{n-1}^{\{l_i\}} \in P[\mathcal{C}_{n-1}, \mathcal{Q}_{n-1}]$, se cumple la relación

$$\mathcal{F}_{\{\rho_i\}}(Y) = e_{A_1}^{l_1} \cdots e_{A_k}^{l_k} \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y) + R_{n-1}^{\{l_i\}} + f_1^{l_1} \cdots f_k^{l_k} \mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}(Y) \tag{2.13}$$

Para aligerar la notación utilizaremos indistintamente $\{\cdot, \cdot\}_{\mathcal{S}} = \{\cdot, \cdot\}$.

Esta relación se muestra más clara con un ejemplo, consideremos el sistema de dos campos de control dados por $f_1 = f$, $f_2 = g$, $A_1 = A$ y $A_2 = B$, entonces para

$$F_{f e_A e_B}([X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]]) = \{e_A, \{e_A, e_B\}\} f^2 g + 2e_A f \{e_A, e_B\} \{f, g\} + e_A^2 e_B \{f, \{f, g\}\}$$

se tiene

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\{f_i\}}([X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]]) &= \{f, \{f, g\}\} \\ \mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}([X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]]) &= \{e_A, \{e_A, e_B\}\} \\ R_1^{\{2,1\}} &= 2e_A f \{e_A, e_B\} \{f, g\} \end{aligned}$$

Para más ejemplos consultar el Apéndice A.

Demostremos (2.13) por inducción.

- Si $n = 1$ las únicas posibilidades son $Y = [X_i, X_j]$ con $1 \leq i, j \leq k$ y por tanto, teniendo en cuenta que $\{f_i, e_{A_j}\}_{\mathcal{S}} = 0$, tenemos

$$\mathcal{F}_{\{\rho_i\}}(Y) = e_{A_i} e_{A_j} \{f_i, f_j\} + f_i f_j \{e_{A_i}, e_{A_j}\}$$

y (2.13) se cumple para $l_i = l_j = 1$ con el resto nulos y $R_0^{\{l_i\}} = 0$.

- Supongamos que (2.13) se cumple para todo $Z \in \Omega_j$ con $j \leq n$. Tomemos $Y \in \Omega_{n+1}$ entonces $Y = [Y_1, Y_2]$ tales que $Y_1 \in \Omega_{m_1}$ y $Y_2 \in \Omega_{m_2}$ con $m_1 + m_2 = n$ con $0 \leq m_1, m_2 \leq n$. Por consiguiente, utilizando la hipótesis de inducción, tenemos

$$\begin{aligned} F_{\{\rho_i\}}(Y) &= \{F_{\{\rho_i\}}(Y_1), F_{\{\rho_i\}}(Y_2)\} = \\ &\left\{ e_{A_1}^{l_1^1} \cdots e_{A_k}^{l_k^1} \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y_1) + R_{n-1}^{\{l_i^1\},1} + f_1^{l_1^1} \cdots f_k^{l_k^1} \mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}(Y_1), \right. \\ &\quad \left. e_{A_1}^{l_1^2} \cdots e_{A_k}^{l_k^2} \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y_2) + R_{n-1}^{\{l_i^2\},2} + f_1^{l_1^2} \cdots f_k^{l_k^2} \mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}(Y_2) \right\} \end{aligned}$$

Reagrupando los términos, con la relación $\{G_{\{f_i\}}(Y_1), \mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}(Y_2)\} = 0$, se tiene

$$\mathcal{F}_{\{\rho_i\}}(Y) = e_{A_1}^{l_1^1+l_1^2} \cdots e_{A_k}^{l_k^1+l_k^2} \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y) + R_n^{\{l_i^1+l_i^2\}} + f_1^{l_1^1+l_1^2} \cdots f_k^{l_k^1+l_k^2} \mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}(Y)$$

donde $R_n^{\{l_i^1+l_i^2\}} \in P[\mathcal{C}_n, \mathcal{Q}_n]$ reescribiendo los términos necesarios con la regla de Leibnitz. Los índices de las variables han aumentado en uno al añadir $\mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}(Y_i)$ y $\mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y_i)$ con $i = 1, 2$ ya que puede suceder que uno de ellos tenga grado de conmutación n .

Con estas herramientas podemos demostrar ahora el teorema.

La idea es la siguiente, siguiendo con el ejemplo anterior con $Y = [X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]]$ tenemos $R_1^{\{2,1\}} = 2e_A f \{e_A, e_B\} \{f, g\}$ luego

$$\pi_*^{m_q}(\{ \cdot, R_1^{\{2,1\}} \}) = 2e_A \{e_A, e_B\} \{f, g\} \{ \cdot, f \} + 2e_A f \{e_A, e_B\} \{ \cdot, \{f, g\} \}$$

Pero

$$\begin{aligned} \{ \cdot, f \} &= \Xi_{M_C} (\mathcal{G}_{\{f_i\}}(X_{\rho_1})) \\ \{ \cdot, \{f, g\} \} &= \Xi_{M_C} (\mathcal{G}_{\{f_i\}}([X_{\rho_1}, X_{\rho_2}])) \end{aligned}$$

que son campos que aparecen en la expresión (2.13) para niveles de conmutación menores al de Y . Así la única dirección nueva que se genera en $T_{m_c} M_C$ es $e_A^{l_1} e_B^{l_2} \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y)$, por tanto si $e_A(m_q), e_B(m_q) \neq 0$ tenemos que $\mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y) \in T_{m_c} M_C$

Veamos la demostración. Por definición $\Omega(X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k})$ genera el álgebra $Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\}$. Tomemos $Y \in \Omega(X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k})$, tenemos por el Teorema 2.3 que $Y = \Xi_S (F_{\{\rho_i\}}(Y))$, pero con la relación $\Xi_S = \Xi_{M_C} + \Xi_{M_Q}$ tenemos $\pi_*^{m_q} \circ \Xi_S = \phi_{m_q} \circ \Xi_{M_C} = \Xi_{M_C} \circ \phi_{m_q}$ donde ϕ_{m_q} es la función que evalúa las funciones en $m_q \in M_Q$, por tanto

$$\pi_*^{m_q}(Y) = \Xi_{M_C} ((\phi_{m_q} \circ F_{\{\rho_i\}})(Y)). \quad (2.14)$$

Pero gracias a (2.13) $F_{\{\rho_i\}}(Y) \in P[\mathcal{C}_n, \mathcal{Q}_n]$, luego $(\phi_{m_q} \circ F_{\{\rho_i\}})(Y) \in P[\mathcal{C}_n]$. Con esta observación $\pi_*^{m_q}(Y)$ está en el espacio que genera $\Xi_{M_C} (\mathfrak{P}\{f_1, \dots, f_k\}_{M_C})$ si consideramos la estructura de módulo que induce sobre él el anillo de funciones $\mathbb{C}^\infty(\mathcal{M}_C)$. Sin embargo como estamos considerando la estructura de espacio vectorial de $\Xi_{M_C} (\mathfrak{P}\{f_1, \dots, f_k\}_{M_C})$ tenemos que el contenido se da en cada punto. En un punto $m_c \in M_C$ se tiene

$$\pi_*^{m_q} (Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\})|_{m_c} \subseteq \Xi_{M_C} (\mathfrak{P}\{f_1, \dots, f_k\}_{M_C})|_{m_c}.$$

Por otro lado vamos a ver que si $h \in \mathcal{O}(f_1, \dots, f_k)$ entonces $\Xi_{M_C}(h)|_{m_c}$ es un elemento de $\pi_*^{m_q} (Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\})|_{m_c}$. Procederemos por inducción sobre los grados de conmutación de h .

- $h \in \mathcal{G}_{\{f_i\}}(\Omega_0)$ entonces $h = f_j$ para algún $1 \leq j \leq k$. Tenemos que

$$\pi_*^C(X_j) = e_{A_j}(m_q) \Xi_{M_C}(f_j)$$

luego suponiendo $e_{A_j}(m_q) \neq 0$ tenemos que

$$h \in \mathcal{G}_{\{f_i\}}(\Omega_0) \implies \Xi_{M_C}(h)|_{m_q} \in \pi_*^{m_q} (Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\})|_{m_c}.$$

- Supongamos $h \in \mathcal{G}_{\{f_i\}}(\Omega_{n+1})$ y la hipótesis es cierta $\forall \tilde{h} \in \mathcal{C}_n$. Tenemos que $\exists Y \in \Omega_{n+1}$ tal que $\mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y) = h$. Por (2.13) y (2.14) podemos escribir

$$\pi_*^C(Y) = e_{A_1}^{l_1}(m_q) \cdots e_{A_k}^{l_k}(m_q) \Xi_{M_C}(h) + \Xi_{M_C}(\phi_{m_q}(T))$$

con $T \in P[\mathcal{C}_n, \mathcal{Q}_{n+1}]$ y por tanto $\phi_{m_q}(T) \in P[\mathcal{C}_n]$. Así, por hipótesis de inducción, $\Xi_{M_C}(\phi_{m_q}(T))|_{m_c} \in \pi_*^{m_q} (Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\})|_{m_c}$. Por tanto

$$e_{A_1}^{l_1}(m_q) \cdots e_{A_k}^{l_k}(m_q) \Xi_{M_C}(h)|_{m_c} \in \pi_*^{m_q} (Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\})|_{m_c},$$

suponiendo $e_{A_j}(m_q) \neq 0$ tenemos que $\Xi_{M_C}(h)|_{m_q} \in \pi_*^{m_q} (Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\})|_{m_c}$.

Como $O(f_1, \dots, f_k)$ genera $\mathfrak{P}\{f_1, \dots, f_k\}_{M_C}$ se tiene

$$\Xi_{M_C} \left(\mathfrak{P}\{f_1, \dots, f_k\}_{M_C} \right) \Big|_{m_c} \subseteq \pi_*^{m_q} (Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\}) \Big|_{m_c},$$

y como consecuencia queda probado el teorema. \square

Un teorema similar puede ser demostrado para el caso cuántico, sin embargo el término $\mathcal{F}_{\{e_{A_i}\}}(Z)$ que aparece en (2.13) admite una interpretación en función de conmutadores de operadores a través de la relación $\{e_A, e_B\} = e_{[A, B]}$. Si consideramos $M_Q = S_{\mathbb{C}}^{n-1}$ podemos cambiar la condición de generar el espacio tangente a la variedad por el de generar con iA_1, \dots, iA_k el álgebra de Lie de un grupo que actúe transitivamente sobre $S_{\mathbb{C}}^{n-1}$. Con esta observación

Teorema 2.5. *Sean $X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}$ campos vectoriales de un sistema de control sobre $\mathcal{S} = M_C \times S_{\mathbb{C}}^{n-1}$ como los descritos en (2.6). Supongamos que f_j no se anula en $m_c \in M_C$ para todo $0 \leq j \leq k$. Entonces $Lie\{iA_1, \dots, iA_k\} = u(n)$, el álgebra de Lie que genera $U(n)$ si y solo si con la proyección $\pi_{m_c} : \mathcal{S} \rightarrow \{m_c\} \times S_{\mathbb{C}}^{n-1}$ para cada $m_q \in S_{\mathbb{C}}^{n-1}$ se tiene*

$$\pi_*^{m_c} (Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\}) \Big|_{m_q} = T_{m_q} S_{\mathbb{C}}^{n-1}$$

donde $\pi_*^{m_c}$ es el pushforward de la proyección π_{m_c} definido en el Lema 1.2.

Este teorema resulta ser cierto para una gran cantidad de casos gracias al siguiente resultado ampliamente utilizado en el estudio de sistemas de control cuántico como se muestra en [6].

Teorema 2.6. *El conjunto de pares $A, B \in su(n)$ tales que $Lie\{A, B\} = su(n)$ es abierto y denso en $su(n)$.*

Por tanto añadiendo la identidad a los campos A y B se genera $u(n)$ con tres campos de control. Otra opción es tomar $M_Q = \mathcal{P}$ y el Teorema 2.5 es cierto cuando iA_1, \dots, iA_k generan $su(n)$, el álgebra de Lie del grupo $SU(n)$.

2.2.2. Control híbrido

Los Teoremas 2.4 y 2.5 dan una herramienta con la que trabajar para buscar las condiciones en las que se cumplan las hipótesis del Teorema 2.1. Esto es, buscamos condiciones sobre $\{f_i\}_{i=1}^k$ y $\{e_{A_i}\}_{i=1}^k$ de manera que el sistema (2.7) cumpla

$$Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\} \Big|_m = T_m \mathcal{S} \quad \forall m \in \mathcal{S} \quad (2.15)$$

En particular se tiene $\forall m_c \in M_C, m_q \in M_Q$

$$\pi_*^{m_q} (Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\}) \Big|_{m_c} = T_{m_c} M_C \quad \text{y} \quad \pi_*^{m_c} (Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\}) \Big|_{m_q} = T_{m_q} M_Q. \quad (2.16)$$

Pero esto gracias a los Teoremas 2.4 y 2.5 se puede traducir en las condiciones necesarias:

$$e_{A_j}(m_q) \neq 0 \quad \forall m_q \in M_Q, \quad \text{y} \quad f_j(m_c) \neq 0 \quad \forall m_c \in M_C, \quad j = 1, \dots, k \quad (2.17)$$

$$\Xi_{M_C} \left(\mathfrak{P}\{f_1, \dots, f_k\}_{M_C} \right) \Big|_{m_c} = T_{m_c} M_C \quad \text{y} \quad Lie\{iA_1, \dots, iA_k\} = u(n) \quad (\text{o } su(n)) \quad (2.18)$$

Buscamos ahora una condición suficiente para que se cumplan las hipótesis del Teorema 2.1. Puede suceder que aunque se cumpla (2.16) en el sistema total

$$Lie\{X_{\rho_1}, \dots, X_{\rho_k}\} \Big|_m \subsetneq T_m \mathcal{S} \quad \forall m \in \mathcal{S}$$

Por esta razón es necesario comprobar (2.15). Un criterio general para el cumplimiento de esta condición es una cuestión abierta en este estudio, sin embargo no se han encontrado ejemplos en los que no se cumpla esta condición si (2.18) y (2.17) se cumplen, la razón es la siguiente:

Nota 2.6. Es de esperar que, salvo casos patológicos, las condiciones (2.17) y (2.18) den lugar a sistemas híbridos controlables ya que un conjunto $B = \{Y_1, \dots, Y_N, Z_1, \dots, Z_n\}$ vectores distintos con $\mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y_i)$ formando una base de de $T_{m_e}M_C$ y $\mathcal{G}_{e_A}(Z_i)$ en general serán base de $T_m\mathcal{S}$ por el argumento que se expone a continuación.

Utilizando la descomposición (2.13), el campo vectorial $\{\cdot, R_{n-1}^{\{l_i\}}\}_{\mathcal{S}}$ no es combinación lineal de otros conmutadores de grado de conmutación menor. Para ver esto basta con examinar el polinomio de $[X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]]$ que se da en (A.5). Por tanto, se puede esperar que B sea base de $T_m\mathcal{S}$. Esto sin embargo no es una prueba de que se cumpla (2.15), cada caso se debe estudiar por separado.

2.3. Conclusiones

Las condiciones (2.17) y (2.18) son condiciones necesarias para aplicar el Teorema 2.1. Esto es, son condiciones necesarias para que se cumpla una condición suficiente para la controlabilidad del sistema. Pese a ello establecen un criterio de diseño de sistemas híbridos que sean controlables. No se ha encontrado un contraejemplo a la suficiencia de dichas condiciones.

La condición (2.17) es muy restrictiva, pero en la práctica esta condición se puede relajar de varias maneras, basta con que los puntos en los que cada función se anula sean conjuntos de medida nula o buscar siempre trayectorias que eviten esos puntos al resolver los problemas de contorno. En el próximo capítulo se construirá un ejemplo que muestra estas características.

Capítulo 3

Resolución numérica de un problema de control híbrido.

En esta sección mostraremos un ejemplo de sistema híbrido que cumple la condición (2.18) y también (2.17) en casi todo punto y realizaremos un test numérico su controlabilidad.

Para elegir el ejemplo tomaremos un campo con dos controles

$$H = H_d + u_1 f(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) e_A(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + u_2 g(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) e_B(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (3.1)$$

H_d , el hamiltoniano de *drift*, será el hamiltoniano de un oscilador armónico bidimensional

$$H_d = \frac{1}{2} \left((Q^1)^2 + P_1^2 + (Q^2)^2 + P_2^2 \right)$$

M_Q será la variedad del sistema de dos niveles \mathbb{C}^2 , sin embargo consideraremos el espacio proyectivo $C\mathbb{P}^1$ que se puede representar como la esfera S^2 tal y como se muestra en el Ejemplo 1.10. Pese a esto utilizaremos en la resolución las ecuaciones en \mathbb{C}^2 . Esto implica que el problema de contorno (2.1) que estamos resolviendo es más general, tenemos que pedir que $x(t_f) \in S$ donde S es la fibra de algún punto de $C\mathbb{P}^1$ definida en (1.26). A tal efecto las matrices A y B serán las matrices de Pauli σ_x y σ_y ya que $i\sigma_x$ y $i\sigma_y$ generan $su(2)$ y representan los observables del Spin en cada dirección.

$$e_{\sigma_x}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = p_1 p_2 + q^1 q^2 \quad e_{\sigma_y}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = p_2 q^1 - p_1 q^2$$

En este contexto los controles u_1 y u_2 tienen interpretación física en función del campo magnético, por ello denotaremos

$$u_1 = B_x \quad \text{y} \quad u_2 = B_y.$$

Para f y g tomaremos las funciones más simples para que se cumpla la condición (2.18). El proceso de elección de estas funciones se detalla en el Apéndice B. Así

$$\begin{aligned} f(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) &= Q^1, & g(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) &= \frac{1}{2} (P_1^2 + P_2^2 - 2Q^1 Q^2) \\ f &= Q^1, & \{f, g\} &= P_1, & \{f, \{f, g\}\} &= Q^2, & \{f, \{f, \{f, g\}\}\} &= P_2. \end{aligned}$$

Así tenemos que el sistema cumple la condición (2.18) y la condición (2.17) se cumple en casi todo punto. Así obtenemos el hamiltoniano de control

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \left((Q^1)^2 + (Q^2)^2 + P_1^2 + P_2^2 \right) + B_x Q^1 (p_1 p_2 + q^1 q^2) \\ &\quad - B_y (p_2 q^1 - p_1 q^2) \frac{1}{2} (P_1^2 - P_2^2 + 2Q^1 Q^2) \quad (3.2) \end{aligned}$$

De este hamiltoniano, con (2.7), se extrae un sistema de ecuaciones diferenciales que depende de B_x y B_y . Este sistema se expone en el Apéndice C.

3.1. Control óptimo

Los teoremas 2.1 y 2.2 dan condiciones para que el problema (2.1) tenga solución. Sin embargo las soluciones de dicho problema, en general, son infinitas. Para establecer un criterio a la hora de resolver el problema exigiremos optimizar una cantidad integral

$$L(T) = \int_0^T \mathcal{L}(x(t), u(t)) dt. \quad (3.3)$$

El problema se puede tratar con una formulación general como hace [3]. Buscamos la solución a un sistema de control

$$(P.C.) = \begin{cases} \dot{x}_1(t) &= f_1(x(t), u(t)) \\ \dots & \\ \dot{x}_k(t) &= f_k(x(t), u(t)) \\ x(0) &= x_i \\ x(t_f) &= x_f \end{cases} \quad \text{Con } x_i, x_f \in M, t_f \in \mathbb{R}.$$

Para ello se construye el Hamiltoniano de Pontriagin \tilde{H}_p sobre $T^*M \times U$, donde T^*M el fibrado cotangente. Las coordenadas sobre la fibra se denotarán Π_i de manera análoga a las coordenadas P_i que siguen a la Definición 1.6.

$$\tilde{H}_p = \sum_{j=1}^k \Pi_j f_j(x, u) + \Pi_0 \mathcal{L}(x, u). \quad (3.4)$$

Con la forma simpléctica de T^*M podemos considerar los campos vectoriales hamiltonianos de manera que sus curvas integrales cumplen las ecuaciones de (P.C.) para las coordenadas de M . Adicionalmente aparecen k ecuaciones para los coestados Π_1, \dots, Π_k . En esta forma podemos enunciar el principio del máximo de Pontriaguin

Teorema 3.1. *Sea $(\tilde{x}(t), \tilde{u}(t))$ la solución de (P.C.) que minimiza el coste (3.3) entonces existe una curva no nula $\tilde{\Pi}(t) = (\tilde{\Pi}_1(t), \dots, \tilde{\Pi}_k(t))$ que cumple*

1. $(\tilde{x}(t), \tilde{\Pi}(t), \tilde{u}(t))$ es curva integral de un campo hamiltoniano definido por \tilde{H}_p con la forma simpléctica de T^*M .
2. $\tilde{H}_p(\tilde{x}(t), \tilde{\Pi}(t), \tilde{u}(t)) = \sup_{u \in \mathbb{R}^n} \tilde{H}_p(x(t), \Pi(t), u)$
3. $\Pi_0 \leq 0$ constante y $\tilde{H}_p(\tilde{x}(t_f), \tilde{\Pi}(t_f), \tilde{u}(t_f)) = 0$

Una buena introducción histórica a este principio se da en [9]. Utilizando este principio podemos encontrar una relación algebraica entre B_x, B_y y Π_i, x_i $i = 1, \dots, k$ y tratar de resolver el problema de contorno resolviendo $2k$ ecuaciones diferenciales acopladas. Para resolver el problema en el que las condiciones iniciales y finales pertenecen a dos subvariedades de \mathcal{S} , $x(0) \in S_0$ y $x(t_f) \in S_f$ se deben utilizar las condiciones de transversalidad, que implican que $\tilde{p}(0)$ tiene que ser ortogonal a cualquier vector tangente a S_0 y $\tilde{p}(t_f)$ tiene que ser ortogonal a cualquier vector tangente a S_f .

3.2. Resolución numérica

Para el hamiltoniano (3.2) el sistema obtenido con el hamiltoniano de Pontriaguin es un sistema de 16 ecuaciones en las que solo 8 variables, P_i, Q^i, p_i, q^i $i = 1, 2$ son significativas a la hora de resolver el problema de control. Las 8 variables restantes Π_i $i = 1, \dots, 8$ dotan al sistema

de grados de libertad suficientes para hallar soluciones al problema. El criterio de optimización que utilizaremos será minimizar la integral

$$L(T) = \int_0^T \frac{B_x^2(t) + B_y^2(t)}{2} dt.$$

El problema se puede resolver de manera más sencilla imponiendo sobre el problema (P.C.) la condición adicional de que sus soluciones para los controles $u(t)$ sean curvas C^∞ . Esto para sistemas de control afín como el que estamos considerando se puede suponer cuando el conjunto de controles admisibles es $U = \mathbb{R}^m$.

De esta manera el problema de control (P.C.) se puede resolver encontrando las condiciones iniciales de los coestados $(\Pi_1(0), \dots, \Pi_n(0))$ para los cuales se cumpla que $x(0) \in S_0$ y $x(t_f) \in S_f$.

Este problema se puede resolver numéricamente con un método de *shooting*, en nuestro caso se ha utilizado el software de integración de *Wolfram Mathematica* para encontrar soluciones a este problema. El sistema de ecuaciones diferenciales asociado al hamiltoniano de Pontriagin se ha calculado con el paquete *sympy* de Python. El código se expone en el Apéndice D. El hamiltoniano de Pontriagin para este sistema se expone en Apéndice C.

Resolveremos el problema para el hamiltoniano (3.2) que cumple

$$\begin{aligned} x &= (Q^1, P_1, Q^2, P_2) \times m_q, & x(0) &= \left(1, -\frac{1}{2}, 0, -1\right) \times \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle, \\ x(4) &= (1, 1, 1, 0) \times |1\rangle, & x(9) &= \frac{1}{2} (1, 1, 1, 2) \times |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Los puntos están escogidos para que no sean muy lejanos a la trayectoria original ya que, para puntos alejados, el sistema necesita que los controles B_x y B_y presenten picos de varios órdenes de magnitud afectando a la convergencia de los métodos numéricos utilizados. La solución a este problema se puede representar gráficamente como

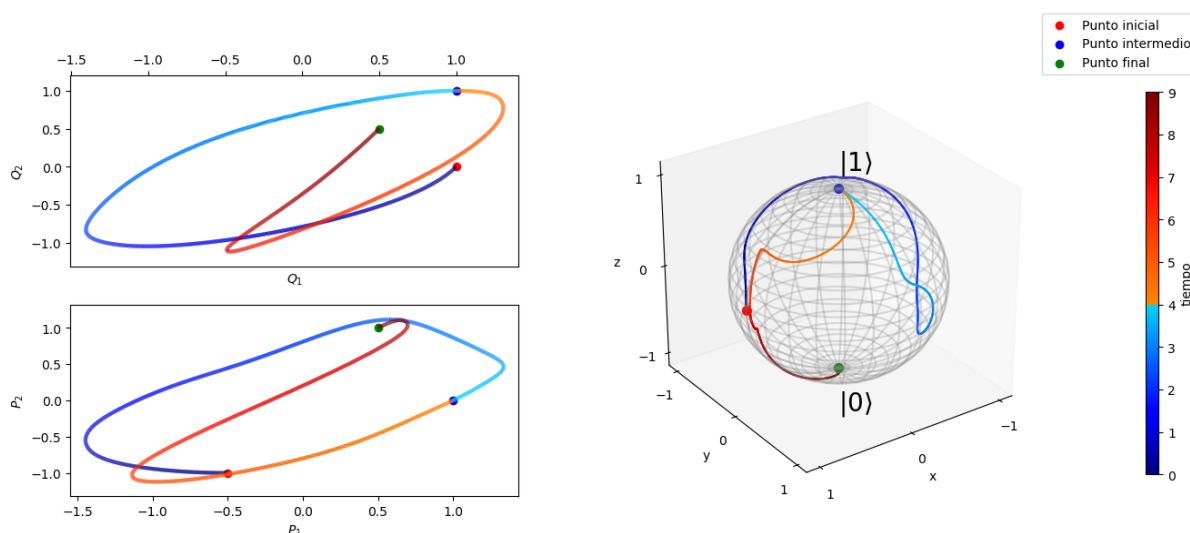


Figura 3.1: Proyecciones de la solución al problema de contorno dado por (3.5) en el plano Q^1Q^2 , P_1P_2 y en la esfera de Bloch, que representa la recta proyectiva compleja.

Los campos de control, que se interpretan como campos magnéticos se representan en la Figura 3.2.

Para la integración se ha utilizado un método Runge-Kutta Gauss-Legendre simpléctico [10] que se ha implementado en Python y se pueden consultar los detalles del código en el Apéndice D. En este apéndice también se puede consultar las condiciones iniciales de este y otros ejemplos de controlabilidad que se han encontrado.

Los puntos elegidos para la parte cuántica de este ejemplo son especialmente significativos, en los estados $|1\rangle$ y $|0\rangle$ las funciones cuánticas e_{σ_x} y e_{σ_y} se anulan contradiciendo la condición necesaria (2.17). También las trayectorias atraviesan varios puntos para los que f o g se anulan. Sin embargo vemos que no es un aspecto realmente relevante a la hora de considerar el problema ya que los conjuntos donde esto pasa son cerrados y cualquier pequeña perturbación hace que las trayectorias vuelvan a regiones donde (2.17) se cumple. Incluso existen soluciones de tiempo finito para alcanzar puntos singulares de este tipo como $|1\rangle$ y $|0\rangle$.

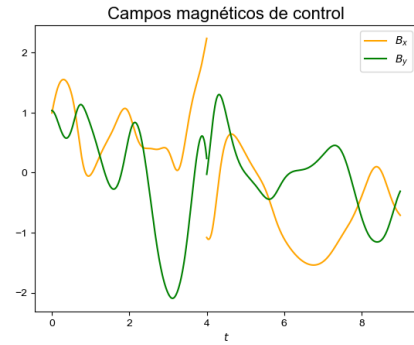


Figura 3.2: Funciones de control a lo largo del tiempo

3.3. Conclusiones

En esta sección se han realizado experimentos numéricos para poner a prueba las condiciones necesarias (2.18) y (2.17). Hemos mostrado un ejemplo en el que, pese a no cumplirse (2.17) en todo punto, hay soluciones para los problemas de control.

Por otra parte encontrar soluciones en este ejemplo concreto ha resultado complicado, muchos de los problemas propuestos no han llegado a converger y los ejemplos obtenidos son siempre puntos cercanos a las trayectorias originales. Observando el comportamiento de este sistema para valores de Π_i arbitrarios se puede ver que B_x y B_y tienden a realizar cambios bruscos donde los errores numéricos se acumulan. Un ejemplo interesante para comprobar el comportamiento de estas condiciones podría ser confinar el conjunto de controles permitidos U en un compacto para mitigar estos efectos. Otros ejemplos relevantes pueden obtenerse con otros criterios de optimización.

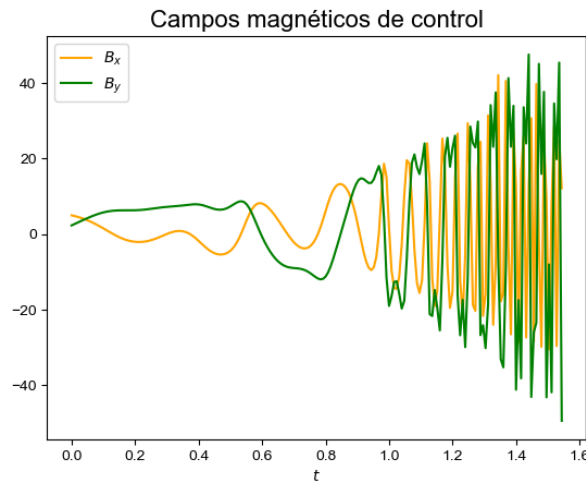


Figura 3.3: Funciones de control a lo largo del tiempo para $\Pi_{q^1}(0) = \Pi_{q^2}(0) = \Pi_{p^2}(0) = 1$ y el resto nulos en el ejemplo (3.5)

Capítulo 4

Conclusiones

En este trabajo se ha planteado la Mecánica Cuántica en un formalismo geométrico que parte de la estructura de variedad de Kähler de los espacios de Hilbert \mathbb{C}^n . Con la forma simpléctica que presenta esta estructura de forma natural hemos realizado una construcción similar a la que, en Mecánica Clásica, se realiza para la forma simpléctica natural de los fibrados cotangentes T^*M . M son las variedades donde las posiciones de las partículas quedan confinadas.

Explotando estas similitudes hemos planteado los sistemas híbridos en los que la variedad de estados \mathcal{S} es el producto cartesiano de las variedades clásica y cuántica $M_C \times M_Q$. Sobre estas variedades se recuperan modelos semiclásicos de la Física como el modelo de Erhenfest, que encuentra su principal aplicación en el estudio de modelos moleculares.

Es en este contexto en el que se ha estudiado el problema de la controlabilidad de los sistemas híbridos. Se han buscado condiciones suficientes para la controlabilidad obteniendo un resultado parcial, para hamiltonianos del tipo

$$H = H_d + \sum_{j=1}^k u_j f_j(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) e_{A_j}(\mathbf{p}, \mathbf{q}),$$

las condiciones (4.1) y (4.2) son condiciones necesarias para aplicar los test habituales de controlabilidad.

$$e_{A_j}(m_q) \neq 0 \quad \forall m_q \in M_Q, \quad \text{y} \quad f_j(m_c) \neq 0 \quad \forall m_c \in M_C, \quad j = 1, \dots, k \quad (4.1)$$

$$\Xi_{M_C} \left(\mathfrak{P} \{f_1, \dots, f_k\}_{M_C} \right) \Big|_{m_c} = T_m M_C \quad \text{y} \quad \text{Lie} \{iA_1, \dots, iA_k\} = u(n) \quad (\text{o } su(n)) \quad (4.2)$$

Se ha argumentado, sin demostración, que estas condiciones en la práctica resultan suficientes en un gran número de sistemas y que la condición (4.1) se puede relajar de distintas maneras.

Con el objetivo de realizar un test numérico de la veracidad de estas condiciones se ha construido un sistema híbrido que cumple la condición (4.2) y, en casi todo punto, la condición (4.1) y se han obtenido algunos ejemplos numéricos de controlabilidad. Para su resolución se ha presentado el concepto de control óptimo y el Principio del Máximo de Pontriaguin como herramienta para resolver problemas de control.

Se ha observado sin embargo que el sistema de control óptimo presenta comportamientos que afectan a la convergencia de los métodos numéricos empleados. El estudio del sistema con otros criterios de optimización queda abierto para otros trabajos.

Bibliografía

- [1] ARNOL'D, VLADIMIR I. *Mathematical methods of classical mechanics*. Vol 60. Springer Science & Business Media, 2013, págs 161-232.
- [2] CLEMENTE-GALLARDO, JESÚS. "The Geometrical Formulation of Quantum Mechanics". *Rev. Real Academia de Ciencias*, 67 (2012), págs. 51-103.
- [3] JURDJEVIC, VELIMIR. *Geometric control theory*. Vol. 52. Cambridge University Press, 1997.
- [4] JOVER GALTIER, JOSE A. "Sistemas cuánticos abiertos: descripción geométrica, dinámica y control". Prensas de la Universidad de Zaragoza, (2017). Tesis Doctoral.
- [5] KOBAYASHI, SHOSHICHI Y KATSUMI NOMIZU. *Foundations of differential geometry*. Vol. 1. y 2. Interscience, New York, 1963.
- [6] ALTAFINI CLAUDIO Y TICOZZI FRANCESCO. "Modeling and Control of Quantum Systems: An Introduction". *IEEE Transactions on Automatic Control* 57.8 (2012): 1898-1917
- [7] KURNIAWAN, INDRA, GUNTHER DIRR, Y UWE HELMKE. "Controllability aspects of quantum dynamics: a unified approach for closed and open systems." *IEEE Transactions on Automatic Control* 57.8 (2012): 1984-1996.
- [8] ALBERTINI, FRANCESCA, AND DOMENICO D'ALESSANDRO. "Notions of controllability for quantum mechanical systems." *Proceedings of the 40th IEEE Conference on Decision and Control* (Cat. No. 01CH37228). Vol. 2. IEEE, 2001.
- [9] SUSSMANN, HECTOR J. Y JAN C. WILLEMS. "300 years of optimal control: from the brachystochrone to the maximum principle." *IEEE Control Systems Magazine* 17.3 (1997): 32-44.
- [10] LANUZA GARCÍA A *Formalismo Geométrico de La Mecánica Cuántica. Integradores Unitarios*. Trabajo de fin de grado, Universidad de Zaragoza, 2016.
- [11] BOGHIU E.-C. *Formulación geométrica de la dinámica y el control de sistemas híbridos clásico-cuánticos*. Trabajo de fin de grado, Universidad de Zaragoza, 2018.

Apéndice A

Boceto de la prueba del Teorema 2.4

Tomaremos un caso particular para dar un boceto de la demostración. El sistema de control es

$$\dot{x}(t) = X_0(x) + u_1(t)X_{\rho_1}(x) + u_2(t)X_{\rho_2}(x) \quad (\text{A.1})$$

Buscamos estudiar qué sucede en cada punto $m \in \mathcal{S} = M_C \times M_Q$, $m = (m_c, m_q)$, con el espacio $Lie\{X_{\rho_1}, X_{\rho_2}\}|_m \subset T_{m_c}M_C \times T_{m_q}M_Q$. Los campos vectoriales involucrados en el sistema de control son

$$\begin{aligned} X_0 &= \{\cdot, H_d\}_{\mathcal{S}}, \\ X_{\rho_1} &= \{\cdot, fe_A\}_{\mathcal{S}} = f\{\cdot, e_A\}_{M_Q} + e_A\{\cdot, f\}_{M_C}, \\ X_{\rho_2} &= \{\cdot, ge_B\}_{\mathcal{S}} = g\{\cdot, e_B\}_{M_Q} + e_B\{\cdot, g\}_{M_C}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Calculando los conmutadores

$$\begin{aligned} [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}] &= \{\cdot, \{e_A, e_B\}fg + e_Ae_B\{f, g\}\}_{\mathcal{S}} \\ [X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]] &= \{\cdot, \{e_A, \{e_A, e_B\}\}f^2g + 2e_Af\{e_A, e_B\}\{f, g\} + e_A^2e_B\{f, \{f, g\}\}\}_{\mathcal{S}} \\ [X_{\rho_2}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]] &= \{\cdot, \{e_B, \{e_A, e_B\}\}fg^2 + 2e_Bg\{e_A, e_B\}\{f, g\} + e_Ae_B^2\{f, \{f, g\}\}\}_{\mathcal{S}} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Con el isomorfismo de álgebras de Lie $\mathcal{F}_{fe_Age_B} : Lie\{X_{\rho_1}, X_{\rho_2}\} \rightarrow \mathfrak{P}\{fe_A, ge_B\}_M$, de manera que $\forall Z_1, Z_2 \in Lie\{X_{\rho_1}, X_{\rho_2}\}$ y $\forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{fe_Age_B} : X_{\rho_1} &\longmapsto fe_A & \mathcal{F}_{fe_Age_B}([Z_1, Z_2]) &= \{\mathcal{F}_{fe_Age_B}(Z_1), \mathcal{F}_{fe_Age_B}(Z_2)\}_M, \\ &\dots & & \\ X_{\rho_2} &\longmapsto ge_B & \mathcal{F}_{fe_Age_B}(\lambda_1 Z_1 + \lambda_2 Z_2) &= \lambda_1 \mathcal{F}_{fe_Age_B}(Z_1) + \lambda_2 \mathcal{F}_{fe_Age_B}(Z_2). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Se tiene

$$\begin{aligned} F_{fe_Age_B}(X_{\rho_1}) &= fe_A \\ F_{fe_Age_B}(X_{\rho_2}) &= ge_B \\ F_{fe_Age_B}([X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]) &= \{e_A, e_B\}fg + e_Ae_B\{f, g\} \\ F_{fe_Age_B}([X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]]) &= \{e_A, \{e_A, e_B\}\}f^2g + 2e_Af\{e_A, e_B\}\{f, g\} + e_A^2e_B\{f, \{f, g\}\} \\ F_{fe_Age_B}([X_{\rho_2}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]]) &= \{e_B, \{e_A, e_B\}\}fg^2 + 2e_Bg\{e_A, e_B\}\{f, g\} + e_Ae_B^2\{f, \{f, g\}\} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Aquí podemos ver que la estructura de las funciones $F_{fe_Age_B}(Y)$ es la de un polinomio. El polinomio tiene tres sumandos relevante. El primero, que denotaremos $R_{n-1}^{\{k,l\}}$, cuyas funciones

son las variables que aparecen como sumandos en los conmutadores anteriores. El resto son los factores primero y último de cada polinomio que denotaremos

$$e_A^k e_B^l \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y) \text{ y } f^k g^l \mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}(Y)$$

donde

$$\mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y) \text{ y } \mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}(Y)$$

son dos funciones nuevas que no aparecían en las expresiones de conmutadores anteriores como variables del polinomio.

Por ejemplo para $F_{f e_A g e_B}([X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]])$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\{f_i\}}([X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]]) &= \{f, \{f, g\}\} \\ \mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}([X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]]) &= \{e_A, \{e_A, e_B\}\} \\ R_{n-1}^{\{k,l\}} &= 2e_A f \{e_A, e_B\} \{f, g\} \end{aligned}$$

Estas funciones nuevas preservan la estructura formal del corchete inicial pero aplicado a las funciones f, g o e_A, e_B en cada caso. Esto se generaliza a la forma:

$$\mathcal{F}_{f e_A g e_B}(Y) = e_A^k e_B^l \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y) + R_{n-1}^{\{k,l\}} + f^k g^l \mathcal{G}_{\{e_{A_i}\}}(Y) \quad (\text{A.6})$$

En la que $R_{n-1}^{\{l_i\}}$ es un polinomio como el descrito anteriormente.

Si nos fijamos solo en la proyección clásica los únicos vectores de cada polinomio que generan direcciones nuevas en $T_{m_c} M_C$ y en cada paso son $e_A^k e_B^l \{ \cdot, \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y) \}_{M_C}$, que solo puede generar la dirección si $e_A, e_B \neq 0$.

Por ejemplo para $F_{f e_A g e_B}([X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]])$ tenemos $R_1^{\{2,1\}} = 2e_A f \{e_A, e_B\} \{f, g\}$ luego

$$\pi_*^{m_q}(\{ \cdot, R_1^{\{2,1\}} \}) = 2e_A \{e_A, e_B\} \{f, g\} \{ \cdot, f \} + 2e_A f \{e_A, e_B\} \{ \cdot, \{f, g\} \}$$

Pero

$$\begin{aligned} \{ \cdot, f \} &= \Xi_{M_C}(\mathcal{G}_{\{f_i\}}(X_{\rho_1})) \\ \{ \cdot, \{f, g\} \} &= \Xi_{M_C}(\mathcal{G}_{\{f_i\}}([X_{\rho_1}, X_{\rho_2}])) \end{aligned}$$

que son campos que aparecen en la expresión (A.5) para niveles de conmutación menores al de $[X_{\rho_1}, [X_{\rho_1}, X_{\rho_2}]]$. Así la única dirección nueva que se genera en $T_{m_c} M_C$ por este polinomio viene dada por el término

$$e_A^{l_1} e_B^{l_2} \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y) = e_A^2 e_B \{f, \{f, g\}\},$$

por tanto si $e_A(m_q), e_B(m_q) \neq 0$ tenemos que $\{ \cdot, \mathcal{G}_{\{f_i\}}(Y) \} \in T_{m_c} M_C$

Esta es la idea principal para demostrar

$$\Xi_{M_C}(\mathfrak{P}\{f, g\}_{M_C}) \Big|_{m_c} = \pi_*^{m_q}(\text{Lie}\{X_{\rho_1}, X_{\rho_2}\}) \Big|_{m_c}$$

Apéndice B

Construyendo el ejemplo

Buscamos un hamiltoniano

$$H = H_d + u_1 f(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) e_A(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + u_2 g(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) e_B(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (\text{B.1})$$

Este se elige de esta forma por razones físicas. Queremos que cumpla

$$\Xi_{M_C} \left(\mathfrak{P} \{f, g\}_{M_C} \right) \Big|_{m_c} = T_{m_c} M_C$$

para ello se escoge la función más simple para $f(\mathbf{Q}, \mathbf{P})$ de manera que la derivada no se anule. Para ello

$$f(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) = Q^1.$$

Sobre el espacio de funciones lineales $\{\cdot, R\}$ actúa como un endomorfismo si R es un polinomio de segundo grado. Si tenemos una forma cuadrática dada por una matriz cuadrada $A = (a_{ij}) = (a_{ji})$ con $1 \leq i, j \leq 2N$ para $(x_i, x_{i+1}) = (Q^i, P_i)^T$ $1 \leq i \leq N$

$$g(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N x_i a_{ij} x_j$$

así

$$\{Q^i, g\} = \frac{\partial}{\partial P_i} g = \sum_{j=1}^N (a_{2i,2j-1} Q^j + a_{2i,2j} P_j) \quad (\text{B.2})$$

$$\{P_i, g\} = -\frac{\partial}{\partial Q^i} g = -\sum_{j=1}^N (a_{2i-1,2j-1} Q^j + a_{2i-1,2j} P_j) \quad (\text{B.3})$$

Luego si $f = \sum_{j=1}^N \alpha_j Q^j + \alpha_{j+1} P_j$ se tiene que

$$\{f, g\} = (x_i)^T (AS) (\alpha_i)$$

con S una matriz $n \times n$ que es diagonal por bloques y tiene la forma

$$S = \begin{pmatrix} S_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & S_2 & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & \cdots & S_2 \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad S_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Para generar $T_{m_c} M_C$ a través del isomorfismo

$$\Xi_{M_C} : \mathfrak{P} \{f, g\} \rightarrow \mathfrak{X}(M_C), \quad h \mapsto \Xi_{M_C}(h) = \{\cdot, h\}_{M_C}.$$

vemos que, examinando (B.2)-(B.3), una base del espacio de funciones lineales homogéneas sobre M_C puede ser generada por los vectores

$$(x_i)^T [AS]^n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad n \in \mathbb{N}$$

Hay que resolver ecuaciones del tipo $AS = B$ luego, como $S^2 = -I_{n \times n}$, hay que escoger B tal que $(BS)^T = BS$, por ejemplo para (Q^1, P_1, Q^2, P_2)

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \implies A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

Obtenemos el polinomio

$$g(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) = \frac{1}{2} (P_1^2 + P_2^2 - 2Q^1 Q^2). \quad (\text{B.5})$$

Que para $T_{m_c} M_C$ da lugar a

$$\begin{aligned} f = Q^1 & \implies \Xi_{M_C}(f) = \frac{\partial}{\partial P_1} \\ \{f, g\} = P_1 & \implies \Xi_{M_C}(\{f, g\}) = -\frac{\partial}{\partial Q^1} \\ \{f, \{f, g\}\} = Q^2 & \implies \Xi_{M_C}(\{f, \{f, g\}\}) = \frac{\partial}{\partial P_2} \\ \{f, \{f, \{f, g\}\}\} = P_2 & \implies \Xi_{M_C}(\{f, \{f, \{f, g\}\}\}) = -\frac{\partial}{\partial Q^2} \\ \{f, \{f, \{f, \{f, g\}\}\}\} = f = Q^1 & \end{aligned}$$

Así se obtiene una base de $T_{m_c} M_C$ que, en este caso particular, no depende del punto. Así queda probado que para el Hamiltoniano

$$H = H_d + u_1 Q^1 e_A(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \frac{u_2}{2} (P_1^2 + P_2^2 - 2Q^1 Q^2) e_B(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (\text{B.6})$$

se tiene

$$\Xi_{M_C} \left(\mathfrak{P} \{f, g\}_{M_C} \right) \Big|_{m_c} = T_{m_c} M_C$$

Apéndice C

Ecuaciones del Capítulo 3

C.1. Ecuaciones de la dinámica

Para el hamiltoniano de control

$$H = \frac{1}{2} \left((Q^1)^2 + (Q^2)^2 + P_1^2 + P_2^2 \right) + B_x Q^1 (p_1 p_2 + q^1 q^2) - B_y (p_2 q^1 - p_1 q^2) \frac{1}{2} (P_1^2 - P_2^2 + 2 Q^1 Q^2)$$

con

$$f(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) = Q^1, \quad g(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) = \frac{1}{2} (P_1^2 + P_2^2 - 2 Q^1 Q^2)$$

$$e_{\sigma_x}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = p_1 p_2 + q^1 q^2 \quad e_{\sigma_y}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = p_2 q^1 - p_1 q^2$$

se cumplen las ecuaciones

$$\dot{Q}^1 = P_1 - B_y P_1 e_{\sigma_y} \quad (C.1)$$

$$\dot{P}_1 = -Q^1 - B_x e_{\sigma_x} + B_y Q^2 e_{\sigma_y} \quad (C.2)$$

$$\dot{q}^1 = +B_x f p_2 + \frac{B_y}{2} g q^2 \quad (C.3)$$

$$\dot{p}_1 = -B_x f q^2 + \frac{B_y}{2} g p_2 \quad (C.4)$$

$$\dot{Q}^2 = P_2 + B_y P_2 e_{\sigma_y} \quad (C.5)$$

$$\dot{P}_2 = -Q^2 + B_y f e_{\sigma_y} \quad (C.6)$$

$$\dot{q}^2 = -B_x f q^1 - \frac{B_y}{2} g p_1 \quad (C.7)$$

$$\dot{p}_2 = +B_x f p_1 - \frac{B_y}{2} g q^1 \quad (C.8)$$

Para $B_x = B_y = 0$ se recuperan las ecuaciones del oscilador armónico.

C.2. Ecuaciones del control óptimo

Para optimizar el coste

$$L(T) = \int_0^T \frac{B_x^2(t) + B_y^2(t)}{2} dt$$

El hamiltoniano de Pontriaguin de este sistema es

$$\begin{aligned} \tilde{H}_p = & \Pi_1 (-B_y P_1 e_{\sigma_y} + P_1) + \Pi_2 (-B_y P_2 e_{\sigma_y} + P_2) + \Pi_3 (B_x f p_2 + B_y q^2 g) + \\ & \Pi_4 (B_x f p_1 - B_y q^1 g) + \Pi_5 (-B_x e_{\sigma_x} - B_y Q^2 e_{\sigma_y} - f) + \Pi_6 (-B_y f e_{\sigma_y} - Q^2) + \\ & \Pi_7 (-B_x f q^2 + B_y p_2 g) + \Pi_8 (-B_x f q^1 - B_y p_1 g) + \Pi_0 \left(\frac{B_x^2}{2} + \frac{B_y^2}{2} \right) \end{aligned}$$

Para obtener la solución óptima se calcula la condición de extremo

$$\frac{\partial \tilde{H}_p}{\partial B_x} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{H}_p}{\partial B_y} = 0.$$

Apéndice D

Programas para la resolución numérica

Aquí se expone el código utilizado en la resolución de los ejemplos numéricos del Capítulo 3. Los archivos se pueden descargar de <https://github.com/davidmartcresp/TFGDavidMartinez>.

D.1. Ecuaciones de control óptimo

Si se ejecuta el siguiente código en un intérprete de python la variable *sistema* guarda la parte derecha (*rhs*) del sistema de ecuaciones de control óptimo para el sistema considerado en el Capítulo 3. El código se puede descargar en <https://github.com/davidmartcresp/TFGDavidMartinez/blob/master/HamiltonianoDePontriaguin.py>

```
from sympy import *
from rk import rk
import numpy as np
import math
from sympy.utilities.lambdify import lambdify

# ecuaciones de movimiento del hamiltoniano H en la forma (\dot{Q}
  }, \dot{P})
def poissonecs(H,X,P):
    """
    devuelve un sistema de ecuaciones para los estados X y los
    coestados P a partir del hamiltoniano H

    INPUT: H-- Symbol; Hamiltoniano
    X-- list de Symbol; Vector de estados
    P-- list de Symbol; Vector de coestados
    OUTPUT: res-- list de Symbol; representa la parte derecha
    del sistema [\dot{X},\dot{P}]=poissonecs(H,X,P)
    """
    res=[]
    for i in P:
        res.append(diff(H,i))
    for i in X:
        res.append(-diff(H,i))
```

```

    return res

#calcula el hamiltoniano de pontryagin para unas ecuaciones y
    coestados determinados
def hpontriagin(ecs,coestados,minim,multipl):
    """
    devuelve un el hamiltoniano de Pontriaguin asociado al
        sistema

    INPUT: ecs-- list de Symbol; rhs de las ecuaciones
    coestados-- list de Symbol; Vector de coestados
    minim -- Symbol; integrando del coste a minimizar
    multipl -- Symbol; El mutliplicador de minim, \Pi_0

    OUTPUT: H-- Symbol; el hamiltoniano de Pontriaguin
        asociado al sistema
    """
    H=0
    for i in range(len(ecs)):
        H+=coestados[i]*ecs[i]
    H+=multipl*minim
    return H

"""#####
        EJEMPLO DE SISTEMA HÍBRIDO
#####"""

# definición de variables
t=Symbol('t')
ep=Symbol('\epsilon')
P1,Q1,P2,Q2,p1,q1,p2,q2=symbols('P_1 Q_1 P_2 Q_2 p_1 q_1 p_2 q_2')
Bx,By=symbols('B_x B_y')
Pi0,Pi1,Pi2,Pi3,Pi4,Pi5,Pi6,Pi7,Pi8=symbols('\Pi_0 \Pi_1 \Pi_2 \
    Pi_3 \Pi_4 \Pi_5 \Pi_6 \Pi_7 \Pi_8')

"""
Hamiltoniano del sistema híbrido
"""

#funciones de acoplo
f=epsilon*Q1
g=epsilon*(P1**2+P2**2-2*Q1*Q2)/2

#hamiltoniano cuantico
sx=p1*p2+q1*q2
sy=p2*q1-p1*q2
sz=(q1**2+p1**2-q2**2-p2**2)

#hamiltonanao del sistema

```

```

H=(Q1*Q1+Q2*Q2+P1*P1+P2*P2)/2+Bx*f*sx-By*g*sy

#variables y variables conjugadas
X=[Q1,Q2,q1,q2]
P=[P1,P2,p1,p2]

"""#####
                    PRINCIPIO DEL MÁXIMO
#####"""
#funcional de coste
L=(Bx**2+By**2)/2

#hamiltoniano de pontrigin
co=[Pi1,Pi2,Pi3,Pi4,Pi5,Pi6,Pi7,Pi8]
Hp=(hpontriagin(poissonecs(H,X,P),co,L,Pi0))

#controles óptimos
Bxoptimo=solve(diff(Hp,Bx),Bx)
Byoptimo=solve(diff(Hp,By),By)
"""
WARNING: solo se comprueba la condición de extremal.
"""

#sistema con controles óptimos
sist=poissonecs(Hp.subs(Bx,Bxoptimo[0]).subs(By,Byoptimo[0]).subs(
    Pi0,-1),X+P,co)

```

D.2. Integración numérica

Para la integración de los ejemplos se ha implementado un algoritmo en Python que implementa un método Runge Kutta dada una tabla de Butcher. Para la implementación del algoritmo se ha seguido [10]. El código se puede consultar en <https://github.com/davidmartcresp/TFGDavidMartinez/blob/master/rk.py>. A continuación se expone la cabecera de la clase implementada.

```

class rk:
    """
    An instance of this class will represent an integrator that
    implements a Runge-Kutta method.
    The Runge-Kutta method is specified by its Butcher's table

           c | A
           -----
           | b^T

    By default the instance will be an explicit Runge Kutta of 4th
    order represented by the Butcher't table

           0 | 0   0   0   0

```



```

1/2 | 1/2  0  0  0
1/2 | 0    1/2  0  0
1   | 0    0   1/2  0
-----
      | 1/6  1/3  1/3  1/6

```

ATRIBUTES:

```

''A'': -- numpy array (default value = array
      ([0,0,0,0],[0.5,0,0,0],[0,0.5,0,0],[0,0,0.5,0]));
      Represents the A matrix of the Butcher's Table.
''b'': -- numpy array (default value = array
      ([1./6.,1./3.,1./3.,1./6.]); Represents the b vector of
      the Butcher's Table.
''c'':-- numpy array (default value = array
      ([0,0.5,0.5,1.]); Represents the c vector of the
      Butcher's Table.
''explic'':-- bool (default value= True); True if the
      Runge-Kutta method is explicit.

```

METHODS:

```

explicit(self): Returns True if self is instance of an
                explicit Runge-Kutta and
                sets the value of the variable self.explic
__call__(self,rhs,u0,N=500,t0=0.,tf=1.) OUTPUT: '''rest,y
''': --performs the iteration of the system given by
      rhs the initial condition is u0, N the number of
      subintervals an t0, tf the initial and final time.

```

NOTES: (README)

```

-- rhs functions should depend on time variables:
An allowed function will be

rhs(t,x1,...,xn)=array([y1,...,yn])

--Explicit an implicit methods are treated separatedly,
implicit methods performs the solution of the
nonlinerasystem with the numpy's newton_krylov method.
-- If the convergence of the Newton's method fails the
partial result already calculated will be returned with
a message of the error.
"""

```

D.3. Ejemplos de controlabilidad

A continuación se expondrán las condiciones iniciales y finales de distintos ejemplos de controlabilidad que se han ido encontrando. Si se ejecuta <https://github.com/davidmartcresp/TFGDavidMartinez/blob/master/severalPlotExamples.py> se mostrarán imágenes con la representación de los ejemplos aquí presentados, (necesario también tener descargado rk.py).

Los ejemplos del capítulo 3 son:

```

import numpy as np
# El tiempo t_f viene indicado por

Tfinal=4

# La condición inicial está guardada en QOP0 con el formato
# [Q^1, Q^2, q^1, q^2, P_1, P_2, p_1, p_2]

QOP0=[1, 0, 1/2, 1/2, -0.5, -1, 1/2, 1/2]

# La condición final está guardada en QfPf con el formato
# [Q^1, P_1, Q^2, P_2], la condición cuántica se especifica en un
  comentario

QfPf=[1, 1, 1 , 0]# \times |1 >

# La condición inicial del sistema extendido de Pontriguin se
  guarda en u0
# coestados es una variable auxiliar que guarda la condición
  inicial de los coestados
# en formato [\Pi_1,\Pi_2,\Pi_3,\Pi_4,\Pi_5,\Pi_6,\Pi_7,\Pi_8]

coestados=np.array([1.23989, -4.04735, 4.15565, 4.95752, -1.98568,
  0.228084, 6.60882, 2.50435])
u0=np.array([m for m in QOP0]+[l for l in coestados])

```

```

import numpy as np
Tfinal=5
QOP0=[1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0]
QfPf=[0.5, 0.5, 0.5, 1]# \times |0>
coestados=np.array([ -0.643419, 0.526499, 8.38667, -0.057135,
  -2.68758, 0.385212, 0, 1.08133])
u0=np.array([m for m in QOP0]+[l for l in coestados])

```

Otros ejemplos similares son:

```

import numpy as np
Tfinal=5
QOP0=[1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0]
QfPf=[0.5, 0.5, 0.75, 1]# \times |0>
coestados=np.array([-0.0625046, 0.0840827, 6.88043, -0.209125,
  -2.6056, 0.255122, 0, 0.959606])
u0=np.array([m for m in QOP0]+[l for l in coestados])

```

```

import numpy as np
Tfinal=5
QOP0=[1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0]
QfPf=[0.5, 0.5, 0.5, 0.5]# \times |0>
coestados=np.array([1.19383, -1.06154, 10.7773, -0.46899,
  -2.95481, -0.381508, 0, -0.314177])

```

```
u0=np.array([m for m in QOP0]+[1 for l in coestados])
```

Un ejemplo diferente es:

```
import numpy as np
Tfinal=5
QOP0=[0.5, 0.5, 0,0, 0.5, 1, 1, 0]
QfPf=[-0.25, -1, 0.5, 0.5] #\times |1>
coestados=np.array([2.12191, -2.00047, 0, 0.723979, 3.5473,
    0.466018, 3.55722, 0.913273])
u0=np.array([m for m in QOP0]+[1 for l in coestados])
```

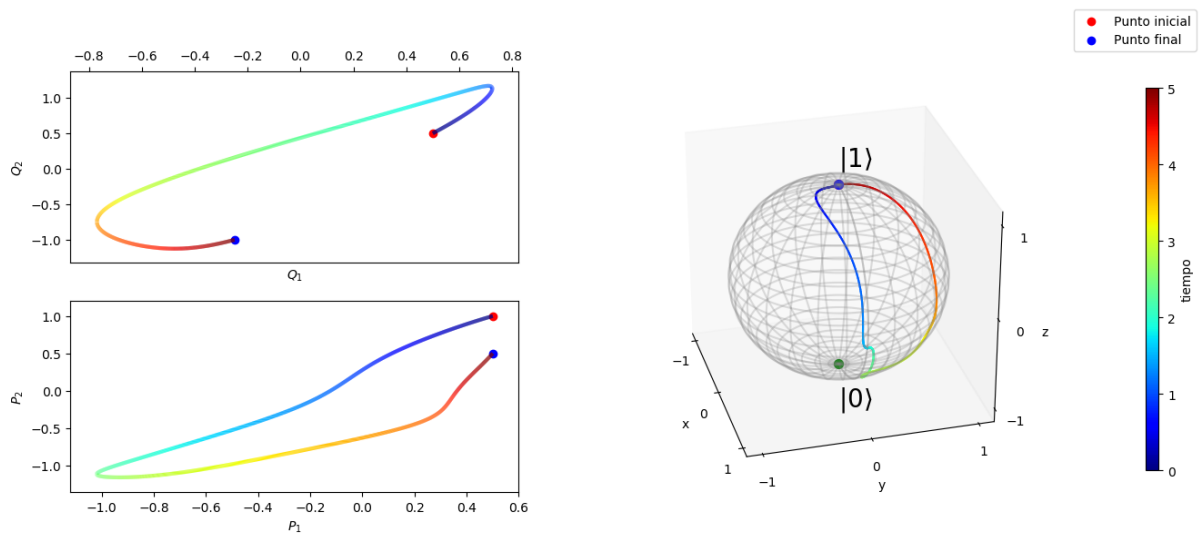


Figura D.1: Ejemplo de solución