

Apéndice A

Varios aspectos matemáticos

A.1. Geometrización del formalismo de Schrödinger

En esta sección comentamos brevemente cómo se lleva a cabo la geometrización del formalismo de Schrödinger (que suponemos conocido) para sistemas de dimensión finita. Ver [4] para una introducción detallada y rigurosa.

Si $\{|b_i\rangle\}$ es una base del espacio de Hilbert del sistema cuántico (de dimensión finita n), entonces

$$|\psi\rangle = \sum c_j |b_j\rangle = \sum q_j + ip_j |b_j\rangle \equiv (q_1, p_1, \dots, q_n, p_n) \quad q_i, p_i \in \mathbb{R}$$

Ahora el conjunto de posibles estados parametrizados por $(q_1, p_1, \dots, q_n, p_n)$ forma una variedad¹ que denotaremos como M_Q . Sobre el espacio tangente a dicha variedad definimos un campo vectorial que *grosso modo* viene a ser otra copia del sistema. Si $|v\rangle = \sum v_j |b_j\rangle = \sum q_j + ip_j |b_j\rangle$, este campo toma la forma

$$X^v := \sum_i q_i \frac{\partial}{\partial q_i} + p_i \frac{\partial}{\partial p_i} \quad q_i, p_i \in \mathbb{R} \quad \frac{\partial}{\partial q_i}, \frac{\partial}{\partial p_i} \in T_v M$$

usando notación habitual de geometría diferencial. Lo necesitamos porque no podemos hacer operaciones como productos internos sobre puntos, sino sobre vectores. Sobre el espacio tangente se puede traducir el producto interno del espacio de Hilbert de dos estados

$$\langle v|w\rangle = \Re(\langle v|w\rangle) + i \Im(\langle v|w\rangle) := g(X^v, X^w) + i\omega(X^v, X^w)$$

denotando por X^v y X^w los campos vectoriales asociados a $|v\rangle$ y $|w\rangle$. El objeto g es simétrico y nos define una *métrica*. El objeto ω es antisimétrico y nos define una *forma simpléctica*.² Para acabar la traducción del producto interno, debemos definir un objeto J que sea equivalente a la unidad imaginaria i . Se define un campo tensorial $(1,1)$ que cumple

$$J^2 = -\mathbb{1} \quad g(JX^v, JX^w) = g(X^v, X^w) \quad \omega(X^v, X^w) = g(JX^v, X^w)$$

¹Además es una variedad “plana”, significando que el espacio tangente es isomorfo a la misma variedad. Esto es porque esencialmente estamos cogiendo las partes reales e imaginarias del espacio vectorial de Hilbert, y los espacios vectoriales son variedades planas o euclídeas.

²Para ganar intuición, cogiendo una base ortonormal del espacio tenemos: $\langle v|w\rangle = \sum (p_{vj} - iq_{vj})(p_{wj} + iq_{wj}) = \sum \left((q_{vj}, p_{vj}) \cdot (q_{wj}, p_{wj}) + i \begin{vmatrix} q_{vj} & q_{wj} \\ p_{vj} & p_{wj} \end{vmatrix} \right) := g(X, X') + i\omega(X, X')$ siendo X, X' los campos asociados a v y w . Tiene sentido usar la palabra “métrica” para g y forma para ω a luz de sus analogías con el producto escalar y el determinante.

Ahora, al conjunto (M_Q, g, ω, J) de la variedad y las estructuras definidas se le llama variedad de Kähler. Comentemos que lo novedoso que introduce la mecánica cuántica es la métrica g y el tensor J ; en ausencia de estos objetos reproduciríamos la mecánica clásica habitual.

Llegados a este punto, tenemos descrito en términos geométricos el espacio de estados. En lo que concierne a los observables, lo que realmente es importante para las predicciones físicas es el valor esperado de un operador y sus autovalores y autoestados. Si definimos la función e_O asociada a un operador O como su valor medio

$$e_O(|\psi\rangle) = \frac{\langle \psi | O | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

entonces ésta caracteriza completamente la física y podemos realizar las mismas predicciones experimentales. Nótese que si $|\psi\rangle$ es un autoestado de O , entonces $e_O(|\psi\rangle)$ es el valor del autovalor. Para hallar los autoestados, podemos imponer $de_O(v) = 0$, porque tenemos un mínimo, máximo o punto silla cuando estamos en un estado propio.³

Observemos que a todos los estados proporcionales entre sí les corresponde mismo valor esperado e_O . Para eliminar esta redundancia, es habitual trabajar con el *rayo* que denotamos $[|\psi\rangle]$ (el conjunto de rayos forma el espacio proyectivo asociado al espacio de Hilbert). Se puede geometrizar el espacio proyectivo, siendo una subvariedad de M_Q , $\mathcal{P} \subset M_Q$. También hay que definir nuevos objetos tensoriales para reducir sobre ella g y ω , los previamente introducidos sobre M_Q . Podemos llegar a definir un corchete de Poisson sobre el proyectivo, $\{\cdot, \cdot\}_{\mathcal{P}}$. Para más detalles matemáticos ver [13, Cap. 1], [18, 4].

Dado el corchete de Poisson $\{\cdot, \cdot\}_{\mathcal{P}}$, se puede definir el campo hamiltoniano asociado al valor esperado del hamiltoniano $e_{\mathcal{H}}$, $X_{e_{\mathcal{H}}}$. El flujo de este campo corresponde a la evolución temporal del sistema, y conlleva a la conservación del valor esperado de la energía.

A.2. Ecuación de Hamilton-Jacobi

Para esta sección se ha consultado principalmente [26]. Para conocer la evolución temporal de la posición $\mathbf{r}(t)$, podemos integrar el campo de velocidad:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{r}(t), t) \quad (\text{A.1})$$

a su vez el campo de velocidades lo podemos conocer integrando su derivada

$$\frac{d\mathbf{v}(\mathbf{r}(t), t)}{dt} = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}(t))}{m} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \frac{dt}{dt} + \frac{d\mathbf{v}}{d\mathbf{r}} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \quad (\text{A.2})$$

donde en la última parte se ha desarrollado la derivada total.

Ahora, se debe comentar que ya hemos hecho una simplificación al suponer que la fuerza no depende de la velocidad ni del tiempo, sino de \mathbf{r} únicamente. Además, se exige que la fuerza sea conservativa, es decir $\mathbf{F} = -\nabla U(\mathbf{r})$. Entonces, cogiendo coordenadas (para ver más fácilmente

³Para demostrar la propiedad, basta con coger una variación del autoestado, $|\psi\rangle + t|w\rangle$, coger la derivada con respecto a el parámetro t y ver que se anula $\left. \frac{d}{dt} \frac{\langle \psi + tw | O | \psi + tw \rangle}{\langle \psi + tw | \psi + tw \rangle} \right|_{t=0} = 0$

los desarrollos, tenemos), llamando $mv_j = p_j$ y despejando

$$\frac{\partial mv_i}{\partial t} + \sum_j \frac{1}{m} (mv_j \cdot \partial_j) mv_i + \partial_i U = 0 \quad (\text{A.3})$$

Ahora, hemos reducido trabajar con magnitudes vectoriales con la fuerza introduciendo un potencial. Podemos intentar hacer lo mismo con el momento, $\mathbf{p} = \nabla S(\mathbf{r}, t)$. El hecho de ser el gradiente de un escalar implica que el rotacional de p es nulo, es decir

$$\partial_i p_j - \partial_j p_i = 0 \rightarrow \partial_i p_j = \partial_j p_i$$

Con todo esto en mente, la Eq. (A.3) queda

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} + \sum_j \frac{1}{2m} \partial_i (p_j^2) + \partial_i U = 0 \rightarrow \partial_i \left[\frac{\partial S}{\partial t} + \sum_j \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U \right] = 0 \quad (\text{A.4})$$

llegando a la ecuación de Hamilton-Jacobi⁴

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = \frac{\partial S}{\partial t} + H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0$$

La dependencia temporal de t en $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ no se ha considerado en este desarrollo, pero se puede ver mediante desarrollos matemáticos rigurosos [1, Cap. 9] que se puede mantener.

A.3. Formalismo de Heisenberg y geometrización

En un primer encuentro con la mecánica cuántica, uno se enfrenta a la ecuación de Schrödinger

$$i \frac{d}{dt} \psi_e = \mathcal{H}_e \psi_e$$

que describe la evolución del sistema cuántico. Un resultado básico de mecánica cuántica es la equivalencia de todos los estados que son proporcionales entre sí (todos estos estados $|\psi\rangle$ forman un “rayo”, $[\psi]$). Normalmente uno se queda únicamente con estados de norma unidad como representantes de los rayos. Equivalentemente, podríamos hablar de *proyectores* (la relación entre un rayo y un proyector sobre el subespacio de dimensión 1 generado por él mismo es 1-1), definiendo la *aplicación momento* respecto a la acción natural del grupo unitario $U(n)$ sobre el espacio de Hilbert o la correspondiente acción sobre el proyectivo (ver [27]):

$$\mu([\psi]) = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle} := \rho_\psi \quad (\text{A.5})$$

que a cualquier estado le asigna el proyector correspondiente. Entonces un estado cuántico puro es equivalente a un proyector, que denotaremos como ρ_ψ . Su evolución temporal, usando la ecuación de Schrödinger, se puede ver que viene dada por

$$i \frac{d\rho_\psi}{dt}(t) = \dot{\rho}_\psi = -i[\mathcal{H}_e, \rho(t)_\psi]$$

⁴La derivada debe ser constante, y dicha constante se puede absorber en el potencial U .

Llegados a este punto, podemos generalizar y definir los *estados mixtos* como sumas convexas de proyectores

$$\rho = \sum \lambda_i \rho_{\psi}$$

donde λ_i se interpreta como la probabilidad estar el sistema cuántico en el estado puro $|\phi_i\rangle$. La gran utilidad de los operadores de densidad está en poder trabajar con sistemas mixtos. Para hallar los valores medios, se usa $\langle \mathcal{H}_e \rangle_{\rho} \equiv \langle \mathcal{H}_e \rangle \equiv \text{tr } \rho \mathcal{H}_e$, siendo $\text{tr}(\cdot)$ la traza de un operador.

La traza denota la suma de los autovalores de un operador, y es independiente de la base. Es importante remarcar que la traza nos permite definir un producto interno para el espacio de operadores lineales,

$$\langle A, B \rangle = \text{tr } AB \quad \forall A, B \in \mathfrak{gl}(n, \mathbb{C})$$

Por comodidad normalizaremos la traza sobre los operadores autoadjuntos, $\text{tr } A \rightarrow \text{tr } A / \text{tr } \mathbb{1}$. En nuestro caso para un sistema de dos niveles, $1 / \text{tr } \mathbb{1} = 1/2$. Definiremos así

$$\langle A, B \rangle := \frac{1}{2} \text{tr } AB,$$

para cualquier par de operadores autoadjuntos.

Sobre la geometrización del formalismo de Heisenberg, sobre el espacio de operadores autoadjuntos podemos considerar dos objetos tensoriales asociados a las estructuras de Lie y de Jordan, definidas por el conmutador y el anticonmutador de operadores (ver [4, 27]). En particular, asociado a la estructura de Lie aparece la estructura de Lie-Poisson, que dota al conjunto de operadores autoadjuntos (identificados a su espacio dual por el producto escalar antes mencionado) de una estructura de Poisson canónica. Respecto a esta estructura de Poisson, podemos considerar campos Hamiltonianos asociados a las funciones sobre el espacio de operadores.

Si consideramos la restricción de la estructura de Poisson a la subvariedad de estados puros, realizada como proyectores sobre subespacios de dimensión 1, es sencillo verificar que ésta corresponde a una hoja simpléctica de la foliación de la variedad de Poisson. Puede probarse también (ver [4]) que la estructura simpléctica correspondiente es la imagen por el *pullback* (de la inversa) de la aplicación momento antes mencionada (Ec. A.5) de la estructura simpléctica canónica del espacio proyectivo $\omega_{\mathcal{P}}$. Se puede demostrar también que la imagen del campo Hamiltoniano asociado a la función $e_{\mathcal{H}}$ en \mathcal{P} , por el *push-forward* de la aplicación momento, define entonces el campo Hamiltoniano asociado a la hoja simpléctica de la estructura de Lie-Poisson, respecto al operador \mathcal{H} .

A.4. Caracterización de la esfera de Bloch

En la Sección A.3 del apéndice hemos comentado la descripción equivalente de estados cuánticos mediante los operadores matriz de densidad. En esta sección mencionaremos brevemente varias de sus propiedades y su caracterización por la esfera de Bloch.

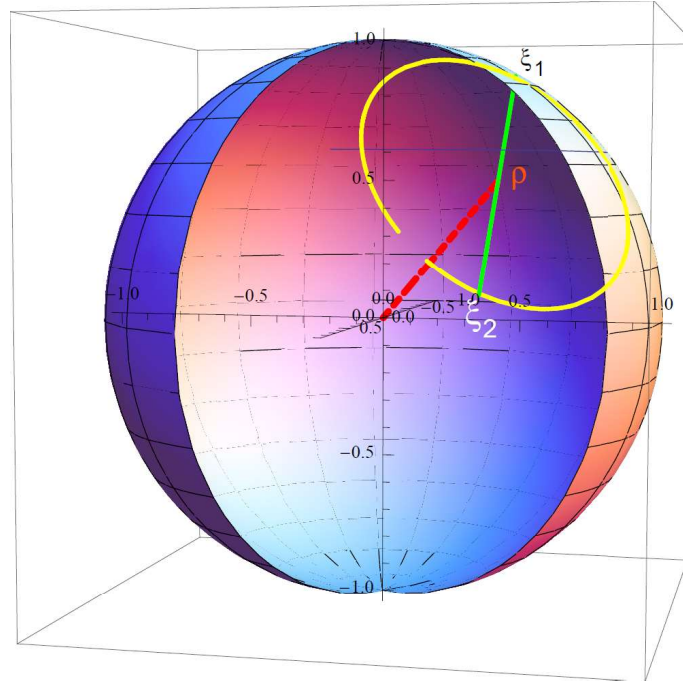


FIGURA A.1: En esta figura se puede observar una representación de la esfera de Bloch. Sobre ella están representados estados puros (círculo amarillo), teniendo a un operador matriz de densidad ρ genérico como combinación convexa de puntos de la superficie. Los puntos de la superficie denotan estados puros y los del interior, estados mixtos. Fuente de la imagen: [4].

Recordemos que

$$\rho = \sum_i \lambda_i \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle}$$

donde λ_i denota la probabilidad clásica de estar el sistema en el estado puro correspondiente a $|\psi_i\rangle$. La matriz densidad debe cumplir siempre $\text{tr } \rho = 1$, porque la suma de todas las probabilidades debe de ser uno. Además $\rho \geq 0$, significando que su espectro es positivo (tiene sentido al interpretarse como probabilidades).

Considerando la base del espacio de operadores de dimensión dos, $\{\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$, es fácil demostrar que los operadores matriz de densidad deben ser de la forma

$$\rho(t) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \rho_x(t)\sigma_x + \rho_y(t)\sigma_y + \rho_z(t)\sigma_z) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

como consecuencia de la anterior propiedad ($\text{tr } \rho = 1$), teniendo en cuenta que la traza es lineal, ($\text{tr}(A + B) = \text{tr } A + \text{tr } B$) y que las matrices de Pauli tienen traza nula ($\text{tr } \sigma_i = 0$). Por lo tanto, hemos reducido el número de coordenadas necesarias para describir un estado de cuatro a tres. Además, se puede ver que las matrices de densidad cumplen

$$0 < \text{tr } \rho^2 = \rho_x^2 + \rho_y^2 + \rho_z^2 \leq 1$$

Esta propiedad tiene sentido: si $\sum \lambda_i = 1$, entonces obviamente $\sum \lambda_i^2 \leq 1$ porque $\lambda_i^2 < \lambda_i$ al

ser todos los λ_i positivos y menores o iguales que uno. Esta última propiedad nos reduce en el espacio tridimensional parametrizado por (ρ_x, ρ_y, ρ_z) a una esfera de radio 1. A esta esfera se le conoce como **esfera de Bloch**, y el “polo norte” corresponde a un estado cuántico y el “polo sur” al otro del sistema de dos niveles. Ver la Figura A.1 para una representación gráfica de la esfera.

El operador matriz de densidad ρ actúa sobre un observable, como por ejemplo el hamiltoniano electrónico del texto principal, \mathcal{H}_e como sigue

$$\text{tr } \rho \mathcal{H}_e = \langle \mathcal{H}_e \rangle$$

y su evolución temporal es

$$i \frac{d\rho}{dt}(t) = \dot{\rho} = -i[\mathcal{H}_e, \rho(t)]$$

devolviendo el valor esperado de dicho observable.

El valor medio de \mathcal{H}_e en función de las coordenadas de ρ es $\text{tr } \rho \mathcal{H}_e = \rho_i \mathcal{H}_i$ (para demostrarlo se debe tener en cuenta que $\sigma_a \sigma_b = \delta_{ab} \mathbb{1} + i \epsilon_{abc} \sigma_c$, donde ϵ_{abc} es el símbolo de Levi-Civita⁵). Para reescribir $-i[\mathcal{H}, \rho]$ se puede usar que $[\sigma_a, \sigma_b] = 2i \epsilon_{abc} \sigma_c$ y las definiciones, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_i \sigma_i$ y $\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \rho_j \sigma_j)$, dando lugar a $-i[\mathcal{H}, \rho] = \epsilon_{ijk} \mathcal{H}_i \rho_j \sigma_k$.

⁵Un objeto antisimétrico bajo permutaciones de los índices y no nulo salvo en el caso en el cual los índices abc son una permutación de 123, teniendo $\epsilon_{123} = 1$.

Apéndice B

Código Python para implementar el test de controlabilidad

En este código se calculan simbólicamente los corchetes de Lie de unos campos vectoriales y se comprueba que estos generan el espacio tangente. Ver el repositorio de GitHub del siguiente enlace para descargar cómodamente el código.

<https://github.com/trahald/TFG>

En el caso de no funcionar el enlace, contacte con el autor.

```

1  #!/usr/bin/env python3
2  # -*- coding: utf-8 -*-
3
4  ### This is code which given some vector field  $X_1, X_2, \dots$ , generates
5  ### the corresponding space  $\text{Lie}(X_1, X_2, \dots)$  and checks whether it
6  ### spans the tangent space or not.
7
8  from __future__ import division # so that 1/2 does not give the loathed 0
9  from IPython.display import display, Math, Latex # beautiful output
10
11 from sympy import *
12 import numpy as np
13 import cmath
14
15 init_printing() # For pretty printing.
16
17 ##### GLOBAL CONTROLS #####
18
19 COUPLING_CONSTANT = 1.0
20
21 MASS = 1.0
22 K_SPRING = 1.0
23 GAMMA = 1.0
24
25 ##### Defining most of the variables #####
26
27 t = symbols('t', real=True);
28 q,p,rx,ry,rz= symbols('q p r_x r_y r_z');

```

```

29 epsilon = symbols('epsilon', real=True);
30
31 sig0 = Matrix([[1, 0],[0, 1]])#/sqrt(2)
32 sig1 = Matrix([[0, 1],[1, 0]])#/sqrt(2)
33 sig2 = Matrix([[0,-1],[1, 0]])#/sqrt(2)
34 sig3 = Matrix([[1, 0],[0,-1]])#/sqrt(2)
35 uibase = Matrix(4,1,([sig0,sig1,sig2,sig3]))
36
37 ##### New hamiltonian.
38
39 #####
40 t = symbols('t', real=True);
41
42 q,p,rx,ry,rz,Hx,Hy,Hz = symbols('q p r_x r_y r_z H_x H_y H_z');
43 cq,cp,crx,cry,crz,cHx,cHy,cHz = symbols(
44     'c_q c_p c_rx c_ry c_rz c_Hx c_Hy c_Hz');
45
46 LeviCivita3 = np.array([[int((i - j) * (j - k) * (k - i) / 2)
47     for k in range(3)] for j in range(3)]
48     for i in range(3)], dtype=np.float64)
49
50 x_tot = Matrix([q,p,rx,ry,rz,Hx,Hy,Hz,cq,cp,crx,cry,crz,cHx,cHy,cHz])
51 size_xtot = int(len(x_tot))
52 x = Matrix([q,p,rx,ry,rz,Hx,Hy,Hz])
53 cx = Matrix([cq,cp,crx,cry,crz,cHx,cHy,cHz])
54 r = Matrix([rx,ry,rz])
55 H = Matrix([Hx,Hy,Hz])
56 cr = Matrix([crx,cry,crz])
57 cH = Matrix([cHx,cHy,cHz])
58
59 VARIABLES = Matrix([p,q,rx,ry,rz,Hx,Hy,Hz])
60
61 m, k = symbols('m k', real=True);
62
63 gamma = GAMMA
64
65 epsilon = symbols('epsilon', real=True);
66
67 ##### THE FUNCTION f(q) which gives the coupling strength.
68
69 #f = 1/sqrt(1+q**2)
70 #f = 1 + COUPLING_CONSTANT*(q**2 + p**2)
71 #f=1 + COUPLING_CONSTANT*q*p
72 f=q
73
74 def sum1 ():
75     sum1 = 0
76     for i in range(0,3):
77         for j in range(0,3):
78             for k in range(0,3):

```



```

79         sum1 = sum1 + -I*2*I* LeviCivita3[i,j,k] * r[j] * H[i] * cr[k]
80     return sum1;
81
82
83 # This is Pontryagin's hamiltonian, see Pontryagin's theorem.
84 h = ( cq*p/m + cp*(-k*q -2* (rx*Hx+ry*Hy+rz*Hz)*(diff(f,q))) + sum1() +
85     1/2*(cHx*cHx + cHy*cHy + cHz*cHz) )
86 h = simplify(h)
87
88 # The dynamics are given by  $\frac{\delta h}{\delta c_x}$ 
89 xtotdot = []
90 for i in range(0,int(len(x_tot)/2)):
91     xtotdot.append( diff(h,cx[i]))
92 #for i in range(0,int(len(x_tot)/2)):
93 #     xtotdot.append(-diff(h,x[i]))
94
95 # 'velocity' is the vector field which gives the dynamics,  $\dot{x} = X$ 
96 velocity = Matrix(xtotdot)
97
98
99 # Now we decompose it in the form
100 X_0 = simplify( velocity.subs(cHx,0).subs(cHy,0).subs(cHz,0))
101 X_1 = simplify( (velocity-X_0).subs(cHy,0).subs(cHz,0)/cHx )
102 X_2 = simplify( (velocity-X_0).subs(cHx,0).subs(cHz,0)/cHy )
103 X_3 = simplify( (velocity-X_0).subs(cHx,0).subs(cHy,0)/cHz )
104 X = X_0 + cHx*X_1 + cHy*X_2 + cHz*X_3
105
106
107 #####
108 ##### COMMUTATORS #####
109 #####
110
111 # We assume next that  $x_a, x_b$  are components of vectors  $X_a, X_b$  in the basis
112 #  $v[0] = \partial_q, v[1] = \partial_p,$ 
113 #  $v[2,3,4] = \partial_\rho,$ 
114 #  $v[5,6,7] = \partial_{\mathcal{H}},$ 
115 # Now, by analyzing  $[X_a, X_b]$  by hand where (implicit sum over repeated
116 # indices) we have that  $x_a = x_a^i \partial_i, x_b = x_b^j \partial_j,$ 
117 # and from applying the operator to  $f, [x_a, x_b]f$  we get that
118 #  $[x_a, x_b]f = (x_a^i (\partial_i x_b^j) - x_b^j (\partial_j x_a^i)) \partial_j f$ 
119 # So now we just apply this formula.
120 def commutator_lie(x_a,x_b):
121     #var = [I_c, a_c, I_1, a_1, I_2, a_2]
122     dim = VARIABLES.shape[0]
123     new_res = []
124     if x_a == x_b:
125         for i in range(0,dim):
126             new_res.append(0)
127     return new_res
128

```

```

129     for j in range(0,dim):
130         summ = 0
131         for i in range(0,dim):
132             summ = summ + ( x_a[i]*diff(x_b[j],VARIABLES[i]) -
133                             x_b[i]*diff(x_a[j],VARIABLES[i]) )
134         new_res.append(summ)
135
136     return simplify(new_res)
137
138 def vector_in_span(family,candidate):
139     nr_fam = len(family)
140     dim     = len(family[0])
141     M       = Matrix( dim, 1, family[0])
142     for e in range(1,nr_fam):
143         M = M.col_insert(e,Matrix(family[e]))
144     rank_M   = len( (M.rref())[1] )
145     augM     = M.col_insert(nr_fam,Matrix(candidate))
146     rank_augM = len( augM.rref()[1] )
147     if rank_M == rank_augM:
148         return True
149     else:
150         return False
151
152 # I am assuming that 'family' is linearly independent already.
153 def is_controllable(family):
154     dim     = len(family[0])
155     nr_fam = len(family)
156     if nr_fam == 1:
157         print('It cannot be controllable if it only has one dimension' +
158               'unless the space is one dimensional. We need at least two' +
159               'in order to take the lie brackets, on which this method is' +
160               'based.')
161         return False
162     M = Matrix( dim, 1, family[0])
163     for e in range(1,nr_fam):
164         M = M.col_insert(e,Matrix(family[e]))
165     rank_M = len( (M.rref())[1] )
166     if rank_M != nr_fam:
167         print('Warning: family not linearly independent.')
168
169     fam = family # We will use this auxiliary vector to modify it.
170     nr_fam = len(fam)
171     #print('nr_fam = ',nr_fam)
172     # We do this so we won't have repeated pairs like [1,2] and [2,1] but just
173     # [1,2]. This is because the commutator is symmetric [1,2] = -[2,1] so
174     # it's just redundant information.
175     index_pairs = []
176     i_list_aux = [i for i in range(0,nr_fam)]
177     j_list_aux = [j for j in range(0,nr_fam)]
178     while i_list_aux: # while list not empty

```

```
179     i = i_list_aux.pop()
180     for j in j_list_aux:
181         index_pairs.append([i,j])
182     j_list_aux.pop()
183     #print(index_pairs)
184
185     new_len_fam = len(fam)
186     while ( new_len_fam<dim and index_pairs ): # While index_pairs not empty.
187         [i, j] = index_pairs.pop()
188         candidate = simplify(commutator_lie(fam[i],fam[j]))
189         print(candidate)
190         if not vector_in_span(fam,candidate):
191             fam.append(candidate)
192             new_len_fam = len(fam)
193             for e in range(0,new_len_fam):
194                 index_pairs.append([new_len_fam-1,e])
195             new_len_fam = len(fam)
196         #display(fam)
197     if (len(fam)==dim):
198         M = Matrix( dim, 1, fam[0])
199         for e in range(1,new_len_fam):
200             M = M.col_insert(e,Matrix(fam[e]))
201         rank_M = len( (M.rref())[1] )
202         display(M.rref())
203         if (len(fam) == rank_M):
204             return True
205         else:
206             print('Warning: good length but rank unequal.')
207             return False
208     else:
209         return False
210
211 print('Is this system controllable?', is_controllable([X_0,X_1,X_2]))
```

Apéndice C

Código Python para hallar el control óptimo

En este código usa un optimizador para hallar las condiciones iniciales óptimas para hallar una solución próxima a la conseguida mediante multiplicadores de Lagrange. Ver el repositorio de GitHub del siguiente enlace para descargar cómodamente el código.

<https://github.com/trahald/TFG>

En el caso de no funcionar el enlace, contacte con el autor.

```

1  #!/usr/bin/env python3
2  # -*- coding: utf-8 -*-
3
4  ### Code to solve the differential equation in order to find the optimum
5  ### trajectory minimizing a cost functional defines as
6  ###  $J = \int \dot{u}^2 dt + \frac{1}{\gamma^2} G(x(T))$ 
7
8  from __future__ import division # so that 1/2 does not give the loathed 0
9  from IPython.display import display, Math, Latex # beautiful output
10
11 from scipy.integrate import odeint
12 import scipy.integrate as inte
13 from scipy.optimize import minimize
14
15 import matplotlib.pyplot as plt
16 import matplotlib
17 from matplotlib import cm, colors
18 from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
19 import pylab
20 from sympy import *
21
22 import matplotlib as mpl
23
24 import numpy as np
25 import cmath
26
27 #init_printing() # For pretty printing.
28

```

```

29 ##### Control constants #####
30 INTEGRATION_METHOD = 'bdf'
31 NSTEPS              = 5000000
32 INTEGRATOR         = 'vode'
33 TO, T1             = 0.0, 1.0
34 DT                 = (T1-T0)/1000.0
35
36 NR_ITERATIONS      = 3
37 ITERATION_DELTA    = 1.0
38 GAMMA_QUANT        = (1e-6)**(0.5) ## NEVER 0, we divide by gamma
39 GAMMA_CLASS        = (1e-3)**(0.5)  ## NEVER 0, we divide by gamma
40 COUPLING_CONSTANT = 1.0
41
42 MASS               = 1.0
43 K_SPRING           = 0.001
44
45 GRAD_NEWTON_DELTA = 1e-6
46
47 # BFGS parameters
48 BFGS_ITERATION    = 100
49 BFGS_ALPHA        = 0.001
50 BFGS_TOLERANCE    = 2
51
52 ## Gradient descent parameters.
53 GRAD_TOLERANCE    = 1
54 GRAD_STEP         = 0.1
55 GRAD_ITER         = 1
56 RANDOM_YO_CONTRIBUTION = 1
57
58 # Initial conditions for our variables..
59 def setup_coord (q0_fin, p0_fin, phi1, theta1, Hx0, Hy0, Hz0, cx):
60     phi1, theta1 = (phi1)*np.pi/180, (theta1)*np.pi/180
61     rx0_fin = 1 * np.cos(phi1) * np.sin(theta1)
62     ry0_fin = 1 * np.sin(phi1) * np.sin(theta1)
63     rz0_fin = 1 * np.cos(theta1)
64     y_blanco1 = np.array([q0_fin, p0_fin,
65                          rx0_fin, ry0_fin, rz0_fin,
66                          Hx0, Hy0, Hz0,
67                          cx[0], cx[1], cx[2],
68                          cx[3], cx[4], cx[5],
69                          cx[6], cx[7]], dtype=np.float64)
70     return y_blanco1
71
72 y0_ini = setup_coord( 1, 1.5, 90, 90, 0, 0, 0, [0,0,0,0,0,0,0,0])
73
74
75 NR_COORD = y0_ini.shape[0]
76
77 def first_half(v):
78     dim = v.shape[0]

```

```

79     return np.array([v[i] for i in range(0, int(dim/2))], dtype=np.float64)
80 def second_half(v):
81     dim = v.shape[0]
82     return np.array([v[int(dim/2)+i] for i in range(0, int(dim/2))],
83                     dtype=np.float64)
84
85 y0_ini = setup_coord(1.1, 0.2, -21, 124, 0.1, 0.2, 0.3,
86                     [3.2,1,-2,-3.3,1.,6,.6,0.3])
87 y0_ini_x = first_half(y0_ini)
88 y0_ini_cx = second_half(y0_ini)
89 GLOB_y0_ini_x = y0_ini_x
90
91
92 #random_addition = np.array([ random.random()
93 #                             for j in range(0,8) ],dtype=np.float64 )
94 #y0_ini_cx = y0_ini_cx + RANDOM_YO_CONTRIBUTION * random_addition
95 #y0_ini_cx = np.array([-0.00097155, -0.01765558, 0.02165133, -0.01016424,
96 #                      0.00900474, 0.01375255, 0.02176548, 0.00433647])
97
98
99 # These serve to impose the 'final' conditions on c_x. Note these aren't the
100 # the boundary conditions, just the objective states which we will need in
101 # order to compute c_x (T).
102 y_blanco = [first_half(setup_coord(1.5, 0.5, 36., 110., 0., 0., 0.,
103                                   [0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.])),
104             first_half(setup_coord( 2., 2., -26., 33., 0., 0., 0.,
105                                   [0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.]))]
106 #         first_half(setup_coord( 3., -1., -65., -295., 0., 0., 0.,
107 #                                 [0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.]))]
108 '''
109 y_blanco = [first_half(setup_coord(1.5, 0.5, 36, 110, 0, 0, 0,
110                                   [0,0,0,0,0,0,0,0]))]
111 '''
112 NR_BLANCOS = len(y_blanco)
113
114
115 ##### Defining most of the variables #####
116 t = symbols('t', real=True);
117
118 q,p,rx,ry,rz,Hx,Hy,Hz = symbols('q p r_x r_y r_z H_x H_y H_z');
119 cq,cp,crx,cry,crz,cHx,cHy,cHz = symbols(
120     'c_q c_p c_rx c_ry c_rz c_Hx c_Hy c_Hz');
121
122 LeviCivita3 = np.array([[int((i - j) * (j - k) * (k - i) / 2)
123                         for k in range(3)] for j in range(3)]
124                        for i in range(3)], dtype=np.float64)
125
126 x_tot = Matrix([q,p,rx,ry,rz,Hx,Hy,Hz,cq,cp,crx,cry,crz,cHx,cHy,cHz])
127 size_xtot = int(len(x_tot))
128 x = Matrix([q,p,rx,ry,rz,Hx,Hy,Hz])

```

```

129 cx      = Matrix([cq,cp,crx,cry,crz,cHx,cHy,cHz])
130 r      = Matrix([rx,ry,rz])
131 H      = Matrix([Hx,Hy,Hz])
132 cr     = Matrix([crx,cry,crz])
133 cH     = Matrix([cHx,cHy,cHz])
134
135 m, k = symbols('m k', real=True);
136
137 epsilon = symbols('epsilon', real=True);
138
139 ##### THE FUNCTION f(q)
140
141 #f = 1/sqrt(1+q**2)
142 #f=1+COUPLING_CONSTANT*(q**2 + p**2)
143 #f=1+COUPLING_CONSTANT*q*p
144 f=q
145 #f=1
146 #####
147
148 def sum1():
149     sum1 = 0
150     for i in range(0,3):
151         for j in range(0,3):
152             for k in range(0,3):
153                 sum1 = sum1 + LeviCivita3[i,j,k] * f * H[i] * r[j] * cr[k]
154     return sum1
155
156
157 # Here we use Pontryagin's hamiltonian from Pontryagins theorem.
158 h = ( cq*p/m + cp*(-k*q -2*(rx*cHx+ry*cHy+rz*cHz))*(diff(f,q))) + sum1() +
159     1/2*(cHx*cHx + cHy*cHy + cHz*cHz) )
160 h = simplify(h)
161
162 # These are then the differential equations:
163 xtodot = []
164 for i in range(0,int(len(x_tot)/2)):
165     xtodot.append( diff(h,cx[i]))
166 for i in range(0,int(len(x_tot)/2)):
167     xtodot.append(-diff(h,x[i]))
168
169 velocity = Matrix(xtodot)
170 longitud = velocity.shape[0]
171 velocity = velocity.subs(m,MASS).subs(k,K_SPRING)
172
173 ## I will calculate jac. scipy ode for documentation.
174 def jacobian(X):
175     var = x_tot
176     long = int(len(x_tot))
177     Dfun=zeros(long,long)
178     for i in range(0,long):

```

```

179     for j in range(0,long):
180         Dfun[i,j]=diff(X[i],var[j])
181     return Dfun
182
183 xtot_list = [q,p,rx,ry,rz,Hx,Hy,Hz,cq,cp,crx,cry,crz,cHx,cHy,cHz]
184
185 Dfun_sym = jacobian(velocity)
186
187 # Now, evaluating jacobian at a number is slow, thus we will
188 # lambdify the function to make it quicker.
189 def jac_lambda(Dfun_sym):
190     Dfun_l = [None]*size_xtot
191     for index in range(0,size_xtot):
192         Dfun_l[index] = [None]*size_xtot
193     for i in range(0,size_xtot):
194         for j in range(0,size_xtot):
195             Dfun_l[i][j] = lambdify( [xtot_list,t],
196                                     simplify(Dfun_sym[i,j]) )
197     return Dfun_l
198
199 Dfun_l = jac_lambda(Dfun_sym)
200
201 def gradient(t,var):
202     res = [None]*size_xtot
203     for index in range(0,size_xtot):
204         res[index] = [None]*size_xtot
205     for i in range(0,size_xtot):
206         for j in range(0,size_xtot):
207             res[i][j] = (Dfun_l[i][j])(var,t)
208     return res;
209
210 fx = []
211 for i in range(0,size_xtot):
212     fx.append( lambdify( [xtot_list,t], velocity[i]) )
213 def func(t,var):
214     res = [None]*size_xtot # Initialized with 6 components
215     for i in range(0,size_xtot):
216         res[i] = fx[i](var,t)
217     return res;
218
219 def f(t, y, arg1):
220     #return [1j*arg1*y[0] + y[1], -arg1*y[1]**2]
221     return func(t,y)
222 def jac(t, y, arg1):
223     #return [[1j*arg1, 1], [0, -arg1*2*y[1]]]
224     return gradient(t,y)
225 ode = inte.ode(f, jac).set_integrator(INTEGRATOR, nsteps=NSTEPS, #order=15,
226                                     method=INTEGRATION_METHOD)
227
228 y0 = np.array(y0_ini, dtype=np.float64)

```



```

229 t0, dt, t1 = T0, DT, T1
230
231 ### This is our time evolution core.
232 def L(cy0):
233     y0 = np.append(GLOB_y0_ini_x, cy0) # y0_ini_cx is a global variable
234     ode = inte.ode(f, jac).set_integrator(INTEGRATOR, nsteps=NSTEPS, order=15,
235                                         method=INTEGRATION_METHOD)
236     ode.set_initial_value(y0,T0).set_f_params(1.0).set_jac_params(1.0)
237     while ode.successful() and ode.t < T1:
238         ode.integrate(ode.t + DT)
239     return ode.y
240
241 # This calculates the gradient of G, somewhat self explanatory.
242 def dGdx (y, y_b):
243     return -1.0* np.array( [ (y[0]-y_b[0])/(GAMMA_CLASS**2),
244                            (y[1]-y_b[1])/(GAMMA_CLASS**2),
245                            0, #(y[2]-y_b[2])/(GAMMA_QUANT**2),
246                            0, #(y[3]-y_b[3])/(GAMMA_QUANT**2),
247                            0, #(y[4]-y_b[4])/(GAMMA_QUANT**2),
248                            0, 0, 0 ], dtype=np.float64 )
249
250 # I use the following two functions later on to print debugging
251 # messages.
252 def coste_qp (y,y_b):
253     return ( 0.5 * (y[0]-y_b[0])**2 / (GAMMA_CLASS**2) +
254            0.5 * (y[1]-y_b[1])**2 / (GAMMA_CLASS**2) )
255
256 def coste_quant (y,y_b):
257     return ( 0.5 * (y[2]-y_b[2])**2 / (GAMMA_QUANT**2) +
258            0.5 * (y[3]-y_b[3])**2 / (GAMMA_QUANT**2) +
259            0.5 * (y[4]-y_b[4])**2 / (GAMMA_QUANT**2))
260
261
262 def Newton_vect(cx_ini, y_b):
263     y_iter = L(cx_ini)
264     length = y_iter.shape[0]
265     loop_max = int(length/2)
266
267     cx_objective = dGdx(y_iter, y_b)
268
269     cx_actual = []
270     for i in range(0, loop_max):
271         cx_actual.append(y_iter[loop_max+i])
272     cx_actual = np.array(cx_actual, dtype=np.float64)
273
274     return [cx_actual, cx_objective]
275
276 #####
277 # The following is the CORE function which measures how far we are from
278 # the optimal solution. We use a log to add numerical stability,

```

```

279 # it does not affect the position of extremum points.
280 # From here on we write some functions for the gradient of Newton_zero
281 # and other things. Not all functions will be used.
282 #####
283 def Newton_zero(y0_cx):
284     var = Newton_vect(y0_cx, GLOB_y_blanco)
285     return np.log((np.dot(var[0]-var[1],var[0]-var[1])))
286
287 cond_ini_cx = [1,2,3,4,5,6,7,5]
288 #basis:
289 identi = eye(len(cond_ini_cx))
290 basis_c = []
291 for e in range(0,len(cond_ini_cx)):
292     basis_c.append(np.array(list(identi[e,:]), dtype=np.float64))
293
294
295 def partial_Newton(func, punto, basis_vector, epsi):
296     return ( (func(punto + epsi*basis_vector) -
297             func(punto - epsi*basis_vector) ) / (2*epsi) )
298
299
300 def grad_Newton(punto):
301     # We define basis vectores along which we will take the
302     # partial derivative.
303     cond_ini_cx = [1,2,3,4,5,6,7,5]
304     longi = len(cond_ini_cx)
305     identi = eye(longi)
306     basis_c = []
307     for e in range(0,longi):
308         basis_c.append(np.array(list(identi[e,:]), dtype=np.float64))
309
310     # Now we calculate all the different partial derivatives.
311     punto = np.array(punto, dtype=np.float64)
312     res = [] # We will store the result in 'res' and we need it to be a
313             # an array type.
314     for e in range(0,punto.shape[0]):
315         res.append(partial_Newton(Newton_zero, punto, basis_c[e],
316                                 GRAD_NEWTON_DELTA))
317         #res.append( (Newton_zero(punto + GRAD_NEWTON_DELTA*basis_c[e]) -
318                 #      Newton_zero(punto - GRAD_NEWTON_DELTA*basis_c[e]) ) /
319                 #      (2*GRAD_NEWTON_DELTA) )
320     res = np.array(res, dtype=np.float64)
321     return res
322
323 def hess_Newton(x,p):
324     # We define basis vectores along which we will take the
325     # partial derivative.
326     cond_ini_cx = [1,2,3,4,5,6,7,5]
327     longi = len(cond_ini_cx)
328     identi = eye(longi)

```

```

329     basis_c = []
330     for e in range(0, longi):
331         basis_c.append(np.array(list(identi[e,:]), dtype=np.float64))
332
333     # Now we proceed to calculate the Hessian.
334     x = (np.matrix(x)).T
335     p = (np.matrix(p)).T
336     dim = x.shape[0]
337     B = np.matrix(np.eye(dim))
338     res = []
339     x = sanitize_x(x)
340     for i in range(0, dim):
341         aux = ( grad_Newton(y0_ini_cx+GRAD_NEWTON_DELTA*basis_c[i])-
342               grad_Newton(y0_ini_cx-GRAD_NEWTON_DELTA*basis_c[i]) )
343             /2/GRAD_NEWTON_DELTA )
344         B[:,i] = np.matrix(aux).T
345     res = B*p
346     #return res ## This returns H*p, a vector.
347     return res
348
349 ### NOTE: As is, it does not work very well.
350 def gradient_descent(y0_cx, tolerance, step_size, max_steps):
351     y0 = np.array(y0_cx, dtype=np.float64)
352     counter = 0
353     dist = 1e88
354     while dist>tolerance and counter<max_steps:
355         dist = Newton_zero(y0)
356         vect = grad_Newton(y0)
357         vect = vect/((np.inner(vect,vect))*0.5)
358         y0 = y0 - step_size*vect
359         counter = counter + 1
360         print('loop: ', counter, ' dist = ', dist)
361     return y0
362
363 # Some functions are picky as to whether the input is an array or list.
364 def sanitize_x (x):
365     dim = x.shape[0]
366     res = [None]*dim
367     res = np.array(res, dtype=np.float64)
368     for i in range(0, dim):
369         res[i] = x[i,0]
370     return res
371
372 # This is a manual implementation of the BFGS optimization algorithm,
373 # but SciPy's implementation is better, and even so it does not converge.
374 def BFGS(y0_cx):
375     # We are assuming y0_cx is an array.
376     dim = y0_cx.shape[0]
377     x = (np.matrix(y0_cx)).T # now a vector
378     B = np.matrix(np.eye(dim))

```

```

379     inv_B = np.matrix(np.eye(dim))
380     alpha = BFGS_ALPHA
381     control_par = Newton_zero(sanitize_x(x))
382     for i in range(0, BFGS_ITERATION):
383         if (control_par > BFGS_TOLERANCE):
384             print('BFGS iter = ', i)
385             grad = np.matrix(grad_Newton(sanitize_x(x))).T
386             p = -inv_B*grad
387             s = alpha*p
388             x = x + s
389             grad_new = np.matrix(grad_Newton(sanitize_x(x))).T
390             y = grad_new - grad
391             yyT = y*y.T
392             yTs = (y.T*s)[0,0]
393             ssT = s*s.T
394             sTy = (s.T*y)[0,0]
395             syT = s*y.T
396             ysT = y*s.T
397             Bs = B*s
398             B = B + ( (yyT)/(yTs) - ( Bs*(s.T*B) ) /((s.T*(Bs))) ) )
399             inv_B = (inv_B + (ssT*(sTy + (y.T*(inv_B*y))[0,0]) / (sTy**2)) +
400                     + ( inv_B*ysT + syT*inv_B)/sTy )
401             control_par = Newton_zero(sanitize_x(x))
402             print('|df/ds| = ', np.sqrt(np.linalg.norm(grad_new)))
403             print('dist = ', control_par)
404         else:
405             return sanitize_x(x)
406
407     return sanitize_x(x)
408
409     ### We will divide the [T0,T1] interval into various parts.
410     NR_POINTS, BIG_T0, BIG_T1 = len(y_blanco), 0.0, 1.0
411     #NR_POINTS = 1
412     T_INTERVAL_ITER = (BIG_T1-BIG_T0)/NR_POINTS
413
414     ### We reassign values to the global variables just in case they changed
415     ### values along the way.
416     y0_ini_x = first_half(y0_ini)
417     y0_ini_cx = second_half(y0_ini)
418     GLOB_y0_ini_x = y0_ini_x
419     GLOB_y0_ini_cx = y0_ini_cx
420
421     ### Plot lists.
422     ts = [[] for i in range(0,NR_POINTS)] # Here we will store the time.
423     res = [[] for i in range(0,NR_POINTS)] # Here we will store the variables.
424     print('GLOB_y0_ini_x= ', GLOB_y0_ini_x)
425     COST_QUANT = 0
426     COST_CLASS = 0
427     endpoints = [] # Here we will store the end points from each
428                    # interval [tj-1,tj].

```

```

429 LIST_cx_ini_iterations = []
430 #####
431 # THIS IS THE CORE LOOP WHERE WE OPTIMIZE EACH INTERVAL SEPARATELY
432 #####
433 for iteration in range(0,NR_POINTS):
434     print('Beginning loop')
435     TO = T_INTERVAL_ITER * iteration
436     T1 = T_INTERVAL_ITER * (iteration + 1)
437     DT = (T1-TO)/1000.0
438     GLOB_y_blanco = y_blanco[iteration]
439     #GLOB_y_blanco = y_blanco[1]
440     print('GLOB_y_blanco = ', GLOB_y_blanco)
441     print('Iteration nr. '+ str(iteration)+'.' )
442         'Started optimization. Unknown wait time.')
443
444     GLOB_y0_ini_cx = np.array([0,0,0,0,0,0,0], dtype=np.float64)
445     OUTPUT = minimize(Newton_zero, GLOB_y0_ini_cx,
446         method='Nelder-Mead', # jac=grad_Newton, hess=hess_Newton,
447         options={'xtol': 1e-6, 'ftol':1e-6, #'adaptive': True,
448             'maxiter': 3000, 'disp': True})
449
450
451     print('Final result. cx_0 = ', OUTPUT.x)
452     y0_ini_cx_final = OUTPUT.x
453     LIST_cx_ini_iterations.append(y0_ini_cx_final) # All vectors saved in
454                                                     # this list will be
455                                                     # printed.
456
457     print('Beginning to set initial values.')
458     ode.set_initial_value(np.append(GLOB_y0_ini_x, y0_ini_cx_final),
459         TO).set_f_params(1.0).set_jac_params(1.0)
460     print('Beginning to integrate.')
461     while ode.successful() and ode.t < T1:
462         ode.integrate(ode.t + DT)
463         ts[iteration].append(ode.t)
464         res[iteration].append(ode.y)
465     print('Finished integration.')
466     COST_CLASS = COST_CLASS + coste_qp(first_half(res[iteration][-1]),
467         GLOB_y_blanco)
468     COST_QUANT = COST_QUANT + coste_quant(first_half(res[iteration][-1]),
469         GLOB_y_blanco)
470     print(iteration, 'AUX cost class = ', COST_CLASS)
471     print(iteration, 'AUX cost quant = ', COST_QUANT)
472     GLOB_y0_ini_x = first_half(res[iteration][-1])
473     endpoints.append(GLOB_y0_ini_x)
474
475     print('GLOB_y0_ini_x= ', GLOB_y0_ini_x)
476     print('Finished loop')
477
478

```

```

479 #####
480 ### Here we write to file the calculates costates.
481
482 #####
483 CONTROL_RUN = 20 # This is useful to label different system runs.
484 #####
485
486 nombre_inicial = 'RUN='
487 file = open(nombre_inicial+str(CONTROL_RUN)+'cx_ini'+'.txt','w')
488 for el in range(0,len(LIST_cx_ini_iterations)):
489     string = ''
490     for e in range(0,len(LIST_cx_ini_iterations[el])):
491         string = string + str(LIST_cx_ini_iterations[el][e]) + ' '
492     file.write(string+'\n')
493 file.close()
494
495 nombre_inicial = 'RUN='
496 file = open(nombre_inicial+str(CONTROL_RUN)+'.yblanco'+'.txt','w')
497 for el in range(0,len(y_blanco)):
498     string = ''
499     for e in range(0,len(y_blanco[el])):
500         string = string + str(y_blanco[el][e]) + ' '
501     file.write(string+'\n')
502 file.close()
503
504 #####
505 #####
506 ### From here on, we are mainly concerned with plotting. The core
507 ### optimization and system evolution is done.
508 #####
509
510 aux_ts = []
511 for iteration in range(0,NR_POINTS):
512     for el in range(0,len(res[0])):
513         aux_ts.append(iteration+ts[iteration][el])
514 ts = aux_ts
515
516
517 plot_normarho = []
518 plot_usquared = []
519 plotobject = [[] for e in range(0,16)] # Beware! Change 16 to your
520 # number of variables.
521
522 ### Now we fuse all the different iterations so that we can plot all the
523 ### intervals together.
524 for nr_iter in range(0,NR_POINTS):
525     for el in range(0,len(res[0])):
526         for coord in range(0,16):
527             plotobject[coord].append(res[nr_iter][el][coord])
528     plot_normarho.append( (res[nr_iter][el][2]**2 +

```

```

529             res[nr_iter][e1][3]**2 +
530             res[nr_iter][e1][4]**2)**(0.5) )
531     plot_usquared.append( 0.5* (res[nr_iter][e1][13]**2 +
532             res[nr_iter][e1][14]**2 +
533             res[nr_iter][e1][15]**2) )
534
535     COSTE_ENERGETICO = 0
536     for i in range(0,len(ts)):
537         COSTE_ENERGETICO = COSTE_ENERGETICO + plot_usquared[i]*DT
538     print('COSTE \int 0.5u^2 = ', COSTE_ENERGETICO)
539     print('COSTE QUANT = ', COST_QUANT)
540     print('COSTE CLASS = ', COST_CLASS)
541
542
543     ##### PLOT
544
545     # Sources: http://www.randalolson.com/2014/06/28/how-to-make
546     #         -beautiful-data-visualizations-in-python-with-matplotlib/
547     # These are the "Tableau 20" colors as RGB.
548     tableau20=[(31, 119, 180), (174, 199, 232), (255, 127, 14), (255, 187, 120),
549             (44, 160, 44), (152, 223, 138), (214, 39, 40), (255, 152, 150),
550             (148, 103, 189), (197, 176, 213), (140, 86, 75), (196, 156, 148),
551             (227, 119, 194), (247, 182, 210), (127, 127, 127), (199, 199, 199),
552             (188, 189, 34), (219, 219, 141), (23, 190, 207), (158, 218, 229)]
553     # Scale the RGB values to the [0, 1] range, which is the format matplotlib
554     # accepts.
555     for i in range(len(tableau20)):
556         r, g, b = tableau20[i]
557         tableau20[i] = (r / 255., g / 255., b / 255.)
558
559     def plot_qp ():
560         plt.figure(figsize=(10, 8))
561
562         plt.style.use('ggplot')
563         plt.style.use('seaborn-talk')
564         plt.xlabel(r'Posición ($q$)')
565         plt.ylabel(r'Momento ($p$)')
566         plt.plot(plotobject[0], plotobject[1],
567                 color=tableau20[0], label=r'$q$ y $p$')
568         for i in range(0,len(y_blanco)):
569             plt.plot(y_blanco[i][0],y_blanco[i][1],
570                     marker = 'D', label= ('Objetivo '+str(i)), color=tableau20[0])
571
572         for i in range(0,len(endpoints)):
573             plt.plot(endpoints[i][0],endpoints[i][1], marker= 'o',
574                     color = tableau20[0])
575
576         plt.plot(y0_ini[0],y0_ini[1], marker= 'o',
577                 label= 'Pto. de la trayectoria', color=tableau20[0])
578         plt.title(r'Evolución de un sistema híbrido controlado')

```

```

579     plt.legend(loc='upper left')
580     plt.show()
581     #pylab.savefig('pq.png', bbox_inches='tight')
582
583 def plot_purity():
584     plt.figure(figsize=(4, 4))
585     plt.style.use('ggplot')
586     plt.style.use('seaborn-talk')
587     plt.xlabel(r'Tiempo ($t$)')
588     plt.ylim(0,1.2)
589     plt.plot(ts, plot_normarho, color=tableau20[2],
590             label = r'Pureza  $\sim \sqrt{\operatorname{tr}\ \rho^2}$ ')
591     plt.title(r'Evolución de la pureza')
592     plt.legend(loc='upper left')
593     plt.show()
594
595 def plot_usquare():
596     plt.figure(figsize=(8, 8))
597     plt.style.use('ggplot')
598     plt.style.use('seaborn-talk')
599     plt.xlabel(r'Tiempo ($t$)')
600     #plt.ylim(0,1.2)
601     plt.plot(ts, plot_usquared, color=tableau20[2],
602             label = r' $\frac{1}{2}u^2$ ')
603     plt.title(r'Coste energético')
604     plt.legend(loc='upper left')
605     plt.show()
606
607 ##### Hamiltonian plot
608 ##### Bloch sphere plot.
609 #Taken from: https://matplotlib.org/gallery/mplot3d/lines3d.html
610 def plot_Hamilt():
611     mpl.rcParams['legend.fontsize'] = 10
612
613     fig = plt.figure(figsize=(9, 9))
614     plt.style.use('ggplot')
615     plt.style.use('seaborn-talk')
616
617     #ax = fig.gca(projection='3d')
618     ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
619
620     #x = np.array([ res[el][5] for el in range(0,len(ts))], dtype=np.float64)
621     #y = np.array([ res[el][6] for el in range(0,len(ts))], dtype=np.float64)
622     #z = np.array([ res[el][7] for el in range(0,len(ts))], dtype=np.float64)
623     x = np.array(plotobject[5])
624     y = np.array(plotobject[6])
625     z = np.array(plotobject[7])
626     # Make data
627     u = np.linspace(0, 2 * np.pi, 100)
628     v = np.linspace(0, np.pi, 100)

```



```

629     x1 = 1 * np.outer(np.cos(u), np.sin(v))
630     y1 = 1 * np.outer(np.sin(u), np.sin(v))
631     z1 = 1 * np.outer(np.ones(np.size(u)), np.cos(v))
632
633     ax.plot_wireframe(x1, y1, z1, color=tableau20[0], rstride=4, cstride=4,
634                     alpha=0.25, label = 'Esfera de Bloch')
635
636     ax.plot(x, y, z, color=tableau20[2],
637            label = r'Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  en el tiempo')
638     #ax.scatter(rx0,ry0,rz0, label = 'Puntos fijos')
639     ax.scatter(y0_ini[5],y0_ini[6],y0_ini[7], marker = 'D',
640            label = 'Punto de inicio')
641
642     ax.legend()
643
644     plt.show()
645     #pylab.savefig('bloch.png', bbox_inches='tight')
646
647 def plot_rho ():
648     ##### Bloch sphere plot.
649     #Taken from: https://matplotlib.org/gallery/mplot3d/lines3d.html
650
651     mpl.rcParams['legend.fontsize'] = 10
652
653     fig = plt.figure(figsize=(9, 9))
654     plt.style.use('ggplot')
655     plt.style.use('seaborn-talk')
656
657
658     #ax = fig.gca(projection='3d')
659     ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
660
661     #2,3,4
662     #x = np.array([ res[el][2] for el in range(0,len(ts))], dtype=np.float64)
663     #y = np.array([ res[el][3] for el in range(0,len(ts))], dtype=np.float64)
664     #z = np.array([ res[el][4] for el in range(0,len(ts))], dtype=np.float64)
665     x = np.array(plotobject[2])
666     y = np.array(plotobject[3])
667     z = np.array(plotobject[4])
668     # Make data
669     u = np.linspace(0, 2 * np.pi, 100)
670     v = np.linspace(0, np.pi, 100)
671     x1 = 1 * np.outer(np.cos(u), np.sin(v))
672     y1 = 1 * np.outer(np.sin(u), np.sin(v))
673     z1 = 1 * np.outer(np.ones(np.size(u)), np.cos(v))
674
675     ax.plot_wireframe(x1, y1, z1, color=tableau20[0], rstride=4, cstride=4,
676                     alpha=0.25, label = 'Esfera de radio 1')
677
678     ax.plot(x, y, z, color=tableau20[2], label = r'Trayectoria de  $\rho$ ')

```

```

679     ax.set_xlabel('X')
680     ax.set_ylabel('Y')
681     ax.set_zlabel('Z')
682     ax.set_xticklabels([])
683     ax.set_yticklabels([])
684     ax.set_zticklabels([])
685
686     ax.text(0, 0, +1.3, r'$\vert 1 \rangle$', size = 'xx-large')
687     ax.text(0, 0, -1.3, r'$\vert 0 \rangle$', size = 'xx-large')
688
689     for i in range(0,len(y_blanco)):
690         ax.scatter(y_blanco[i][2], y_blanco[i][3], y_blanco[i][4],
691                 label = 'Objetivo '+str(i), marker = 'D')
692
693     for i in range(0,len(endpoints)):
694         ax.scatter(endpoints[i][2], endpoints[i][3], endpoints[i][4],
695                 c=tableau20[2], marker = 'o')
696
697     ax.scatter(y0_ini[2],y0_ini[3],y0_ini[4], marker = 'o', c=tableau20[2],
698             label = 'Pto. trayectoria')
699
700     ax.legend()
701     plt.show()
702     #pylab.savefig('bloch.png', bbox_inches='tight')
703
704 def plot_costates():
705     labels = [r'$c_{q}$', r'$c_{p}$', r'$c_{\rho x}$', r'$c_{\rho y}$',
706             r'$c_{\rho z}$', r'$c_{\mathcal{H} x}$',
707             r'$c_{\mathcal{H} y}$', r'$c_{\mathcal{H} z}$']
708     plt.figure(figsize=(8, 8))
709     plt.xlim(0,1.3)
710     plt.style.use('ggplot')
711     plt.style.use('seaborn-talk')
712     plt.xlabel(r'Tiempo ($t$)')
713     #plt.ylabel(r'Coestados')
714     #plt.ylim(0,1.2)
715     for el in range(0,8):
716         plt.plot(ts, plotobject[8+el], color=tableau20[el],
717                 label = labels[el])
718     plt.title(r'Los coestados')
719     plt.legend(loc='center right')
720     plt.show()
721
722 #plot_costates()
723 #plot_usquare()
724 plot_rho()
725 plot_qp()
726 #plot_Hamilt()
727 #plot_purity()

```
