



**CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DE ESTUDIOS AVANZADOS  
DEL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**

**Unidad Zacatenco**

**Departamento de Control Automático**

**“Control óptimo para sistemas cuánticos”**

**TESIS**

Que presenta

**Jesus Nazario Piñon Meza**

Para obtener el grado de

**Maestro en Ciencias**

**En la especialidad de Control Automático**

Director de Tesis:

Dr. Moisés Bonilla Estrada

Ciudad de México

Abril, 2024

### **Agradecimientos**

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT), por la beca otorgada para la realización de mis estudios de maestría.

Quiero expresar mi más profundo agradecimiento. A mis asesores Dr. Moise Bonilla Licea y al Dr. Moisés Bonilla Estrada por su guía constante y sus valiosos consejos durante todo el proceso. Gracias a su experiencia y dedicación, pude enfrentar cada obstáculo y superarlo con éxito.

## **Dedicatoria**

A mi familia, quienes me brindaron todo su apoyo y motivación en los momentos difíciles y que me impulsaron a seguir adelante en este camino.

# Resumen

La presente tesis se controló la distancia intermolecular de una molécula diatómica mediante un pulso láser, cuya energía fue optimizada, así como sus probabilidades de transición. Esto se logró aplicando un algoritmo analítico y fácil de implementar. En particular, se eligió el reciente método Bonilla–Bonilla [1] para diseñar el control óptimo del sistema cuántico en cuestión. El método Bonilla–Bonilla ofrece tres ventajas respecto del método de Rabitz: Para empezar, permite la escritura de una representación de estado de las cantidades estadísticas; es decir, se trabaja con ecuaciones ordinarias y reales. En segundo lugar, el tratamiento de cantidades estadísticas en forma de representación de estado, permite la aplicación de la teoría convencional de control óptimo. Esto implica que su implementación numérica no necesita algoritmos sofisticados, sino que la solución puede obtenerse mediante una paquetería común de simulación, como SIMULINK.

# Abstract

In this thesis, the intermolecular distance of a diatomic molecule was controlled using a laser pulse, whose energy was optimized, as well as its transition probabilities. This was achieved by applying an analytical and easy-to-implement algorithm. In particular, the recent Bonilla–Bonilla [1] method was chosen to design the optimal control of the quantum system in question. The Bonilla–Bonilla method offers three advantages over the Rabitz method: To begin with, it allows the writing of a state representation of the statistical quantities; That is, you work with ordinary and real equations. Secondly, the treatment of statistical quantities in the form of state representation allows the application of conventional optimal control theory. This implies that its numerical implementation does not require sophisticated algorithms, but rather that the solution can be obtained using a common simulation package, such as SIMULINK.

# Objetivo

En el presente trabajo, se busca aplicar el método Bonilla–Bonilla para controlar la distancia interatómica de una molécula diatómica, mediante el uso de un pulso láser optimizando su energía  $\int_0^T u^2(t)dt$ ,  $k > 0$ , así como la probabilidad de transición molecular. En particular, se considerará que la molécula está aislada (sin interacción con el medio ambiente), y la interacción interatómica se modelará mediante el potencial de Morse [2] que, posteriormente, se aproximará a un oscilador armónico. En cuanto a la interacción entre la molécula y el láser, se usará (como es habitual) la aproximación semiclásica del dipolo eléctrico, así como la función de Mecke

# Índice general

Índice de figuras . . . . .	IX
Índice de tablas . . . . .	XII
Abreviaturas . . . . .	1
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Estados cuánticos</b>	<b>5</b>
2.1. Definición . . . . .	5
2.2. Observables . . . . .	8
2.3. Estados coherentes . . . . .	10
2.3.1. Caracterización de los estados coherentes . . . . .	11
2.3.2. Producto de dos estados coherentes . . . . .	13
2.3.3. Probabilidad de transición . . . . .	14
<b>3. Modelo matemático</b>	<b>16</b>
3.1. Dinámica del sistema . . . . .	21
3.2. Dinámica de los promedios $\langle \hat{X} \rangle$ y $\langle \hat{P} \rangle$ . . . . .	24
3.3. Dinámica de las incertidumbres $\sigma_X$ y $\sigma_P$ , y la correlación $\sigma_{XP}$ . . . . .	25
3.4. Representaciones de estado . . . . .	31

3.4.1.	Representación de estado de los promedios $\langle \hat{X} \rangle$ y $\langle \hat{P} \rangle$ . . . . .	31
3.4.2.	Representación de estado de las incertidumbres, $\sigma_X^2$ y $\sigma_P^2$ y la correlación $\sigma_{XP}$ . . . . .	32
<b>4.</b>	<b>Regulador cuadrático lineal: tiempo finito</b>	<b>34</b>
4.1.	Problema de control óptimo . . . . .	34
4.2.	Ejemplo académico extraído de [3] . . . . .	36
4.2.1.	Ley de Control Óptimo . . . . .	37
4.2.2.	Caso (1) estado de frontera fija . . . . .	39
4.2.3.	Caso (2) estado de frontera libre . . . . .	40
4.2.4.	Resultados de simulación . . . . .	42
<b>5.</b>	<b>Problema de control óptimo para una molécula diatómica</b>	<b>47</b>
5.1.	Problema de optimización: Esquema de función de onda . . . . .	47
5.2.	Problema de optimización: Esquema de valores medios . . . . .	50
5.3.	Criterios incrementales . . . . .	53
5.4.	Solución incremental . . . . .	57
5.5.	Caso (1) estado de frontera fija . . . . .	62
5.6.	Caso (2) estado de frontera libre . . . . .	63
5.7.	Resonancia . . . . .	66
<b>6.</b>	<b>Simulaciones</b>	<b>72</b>
6.1.	Sistema . . . . .	72
6.1.1.	Cálculo de la ley de control óptimo para el caso (1) estado de frontera fija . . . . .	78

6.1.2. Cálculo de la ley de control óptimo para el caso (2) estado libre . . . . .	83
6.2. Simulación . . . . .	89
6.2.1. Simulación, caso (1) estado de frontera fija . . . . .	90
6.2.2. Simulación, caso (2) estado de frontera libre . . . . .	93
<b>7. Conclusión</b>	<b>96</b>
Referencias . . . . .	100
<b>Índice de tablas</b>	<b>102</b>

# Índice de figuras

2.1. Diagrama fase de los promedios de un estado coherente . . . . .	15
3.1. Potencial de morse para una molécula diatómica . . . . .	20
3.2. Momento dipolar eléctrico de la molécula diatómica . . . . .	21
4.1. Representación esquemática del cuarto a temperatura $\theta(t)$ con una fuente de calor $u(t)$ . . . . .	36
4.2. Diagrama SIMULINK del sistema (4.3), sujeto a la funcional (4.4), dado el control óptimo (4.14). Caso (1) estado de frontera fija. . .	42
4.3. Diagrama SIMULINK del bloque correspondiente a la acción de control óptima (4.14). Caso (1) estado de frontera fija. . . . .	42
4.4. Diagrama SIMULINK del sistema (4.3), sujeto a la funcional (4.4), dado el control óptimo (4.14). Caso (2) estado de frontera libre. . .	44
4.5. Diagrama SIMULINK del bloque correspondiente a la acción de control óptima (4.20). Caso (2) estado de frontera libre. . . . .	44
4.6. Temperatura $\theta(t)$ , en función del tiempo $0 \leq t \leq 10$ . estado de frontera fija y libre. . . . .	46
4.7. Funcional de costo $J$ (4.4), en función del tiempo $0 \leq t \leq 10$ . estado de frontera fija y libre. . . . .	46

4.8.	Acción de control $u_*$ (4.20), en función del tiempo $0 \leq t \leq 10$ . estado de frontera fija y libre. . . . .	46
5.1.	Equivalencia entre los comportamientos basados en función de onda y valores medios. . . . .	53
5.2.	Diagrama de Bode de la función de transferencia (5.62). . . . .	69
6.1.	Potencial molecular de Morse aproximado por un oscilador armónico. . . . .	76
6.2.	Momento dipolar eléctrico de la molécula, aproximado por un oscilador armónico. . . . .	76
6.3.	Referencia $r_X$ y $r_P$ para las particiones $N_1 = 1, N_2 = 10, N_3 = 100$ . . . . .	78
6.4.	Parámetros para el diseño del control, para $N_1 = 1$ . Caso (1) estado de frontera fija. . . . .	82
6.5.	Parámetros para el diseño del control, para $N_2 = 10$ . Caso (1) estado de frontera fija. . . . .	82
6.6.	Parámetros para el diseño del control, para $N_3 = 100$ . Caso (1) estado de frontera fija. . . . .	83
6.7.	Parámetros para el diseño del control, para $N_1 = 1$ . Caso (2) estado de frontera libre. . . . .	87
6.8.	Parámetros para el diseño del control, para $N_2 = 10$ . Caso (2) estado de frontera libre. . . . .	88
6.9.	Parámetros para el diseño del control, para $N_3 = 100$ . Caso (2) estado de frontera libre. . . . .	88
6.10.	Comportamiento del sistema y ley de control, con $N_1 = 1$ . Caso (1) estado de frontera fija. . . . .	90

6.11. Comportamiento del sistema y ley de control, con $N_2 = 10$ . Caso	
(1) estado de frontera fija. . . . .	91
6.12. Comportamiento del sistema y ley de control, con $N_3 = 100$ . Caso	
(1) estado de frontera fija. . . . .	92
6.13. Comportamiento del sistema y ley de control, con $N_1 = 1$ . Caso	
(2) estado de frontera libre. . . . .	93
6.14. Comportamiento del sistema y ley de control, con $N_2 = 10$ . Caso	
(2) estado de frontera libre. . . . .	94
6.15. Comportamiento del sistema y ley de control, con $N_3 = 100$ . Caso	
(2) estado de frontera libre. . . . .	95

# Índice de tablas

4.1. Pasos para implementar un controlador óptimo no lineal continuo con función de estado fijo final . . . . .	35
6.1. Constantes y factores de escala empleados en la simulación. . . . .	73
6.2. Parámetros del sistema diatómico. . . . .	74

# Capítulo 1

## Introducción

Desde su aparición en 1960, los láseres han sido empleados como “pares de tijeras operando a escala molecular” [4] debido a que su frecuencia (de Terahertz a miles de Terahertz) está en el rango necesario para ocasionar transiciones energéticas de los sistemas moleculares. Esto permitió la utilización del láser como agente de reacciones químicas, al romper o manipular enlaces químicos [2]. Esto tiene una gran repercusión en el desarrollo actual de la industria química y farmacéutica [5; 6], ya que economiza el desarrollo de productos. En efecto, la reacción química se ocasiona ahora mediante un agente físico (el láser), en lugar de uno químico (insumos químicos). Además, esto reduce el impacto ambiental al evitar la producción de desechos químicos secundarios. En el ámbito teórico, se busca diseñar señales láser, de manera óptima, para dirigir moléculas a objetivos específicos, o para manipular la distancia intermolecular, en escalas de tiempo ultrarrápidas (de femtosegundos a picosegundos) [2]. Las señales láser deben optimizarse para lograr un empleo de mínima energía durante cada operación molecular. Esto corresponde a una búsqueda de un control óptimo.

La aplicación de la teoría de control óptimo a sistemas cuánticos se centra en la minimización simultánea de una funcional  $J$  que involucra el estado  $x$  y el control del sistema  $\dot{x} = f(x, u)$  [3]. Esto tiene varias implementaciones, en particular dos: Por un lado, se puede efectuar el control de un sistema cuántico mediante la manipulación de la estructura algebraica asociada al sistema cuántico, ver por ejemplo [7]. Por otro lado, existe un estándar que inició el grupo de investigación de Rabitz en 1988 [8]. Se basa en la aplicación de la teoría de control óptimo directamente a la ecuación de Schrödinger. Esto se logra mediante algoritmos numéricos e iterativos, como en dinámica molecular, donde obtención de soluciones analíticas no es trivial, y generalmente se limita a casos de simetrías especiales. Cabe destacar que en la metodología de Rabitz [8; 9; 10; 11] se trabaja con una ecuación diferencial parcial que requiere la solución de ecuaciones no lineales acopladas [10]. Ahora bien, recientemente surgió un método alternativo para controlar sistemas cuánticos, evitando el tratamiento directo de la ecuación de Schrödinger [1]. El método Bonilla–Bonilla se basa en la incorporación de las cantidades estadísticas del sistema cuántico en el estado; de esta manera, se logra la implementación analítica del control sobre el sistema cuántico, haciendo uso de la representación de estado convencional.

Como se afirma en el prefacio del libro de Polderman & Willems [12], el corazón del enfoque del comportamiento es “la noción de un sistema dinámico como un conjunto de trayectorias temporales, una familia de señales variantes en el tiempo, que adquieren valores en un espacio de señal adecuado”.

Esto permite una mejor comprensión de las trayectorias solución del sistema en estudio, y de la propiedad estructural de alcanzabilidad. También permite analizar la convergencia entre trayectorias solución del sistema.

En este trabajo de tesis, se obtienen dos representaciones para describir la dinámica de los valores medios. La primera representación es un modelo dinámico lineal, invariante en el tiempo. La segunda representación es una partición mediante modelos lineales, invariantes en el tiempo. El enfoque del comportamiento es la herramienta adecuada para estudiar las convergencias entre ambas representaciones. Una vez establecida la convergencia entre ambos modelos, se procede a la aplicación de técnicas clásicas de control óptimo diseñadas para los sistemas lineales invariantes en el tiempo.

Dado que para el caso de los sistemas cuánticos es muy importante no solo determinar la trayectoria del estado, sino también la trayectoria de entrada, entonces la alcanzabilidad del comportamiento es el concepto de alcanzabilidad más preciso para este tipo de sistemas

En este contexto, en el presente trabajo, se busca aplicar el método Bonilla–Bonilla para controlar la distancia interatómica de una molécula diatómica, mediante el uso de un pulso láser optimizando su energía  $\int_0^T u^2(t)dt$ ,  $k > 0$ , así como la probabilidad de transición molecular. En particular, se considerará que la molécula está aislada (sin interacción con el medio ambiente), y la interacción interatómica se modelará mediante el potencial de Morse [2] que, posteriormente, se aproximará a un oscilador armónico. En cuanto a la interacción entre la molécula y el láser, se usará (como es habitual) la aproximación semiclásica del dipolo eléctrico, así como la función de Mecke [2]. Es importante volver a señalar que la aplicación del método Bonilla–Bonilla, por un lado, provee un tratamiento analítico y, por otro lado, evita el problema de los métodos numéricos sofisticados que requieren un análisis extensivo sobre la convergencia.

Para lograr el objetivo antes marcado, la presente tesis está organizada de la

siguiente manera: En primer lugar, en el Capítulo 2, se presentan las herramientas matemáticas básicas de los sistemas cuánticos que se utilizaron en la tesis. En particular en la Sección 2.1 se revisa el concepto de estado cuántico, para no confundirlo con el estado de control. En la Sección 2.2 se presenta brevemente el concepto de operadores cuánticos y en la Sección 2.3, se describen los estados coherentes que se utilizarán. Después, en el Capítulo 3, se justificará y presentará el modelo matemático del sistema (la molécula diatómica). En las Secciones 3.1, 3.2 y 3.3, se presenta la dinámica del sistema, de los promedios y el de las incertidumbres así como la correlación, respectivamente. En la sección 3.4, se muestra la representación de estado del sistema en consideración. En cuanto al Capítulo 4, se hará un breve recordatorio sobre la técnica de control óptimo que se utilizó: El regulador cuadrático lineal. A lo largo de este capítulo se mostrará la solución a un problema de optimización básico, ver Sección 4.2.1. En las Secciones 4.2.2 y 4.2.3 detallaremos los diferentes casos de frontera. En la sección 4.2.4, se presentan los resultados de la simulación. Ahora bien, en el Capítulo 5, teniendo en cuenta los capítulos pasados, se planteará el problema de control óptimo para el sistema antes descrito bajo el método de Bonilla–Bonilla. En la Sección 5.1 se presenta el problema de optimización a tratar; posteriormente, en la Sección 5.2, se realizan las representaciones de estado incrementales del sistema. En la Sección 5.4, se obtiene la solución incremental. En las Secciones 5.5 y 5.6, se calcularon el estado de frontera fijo y libre. En la Sección 5.7, se incorpora el concepto de resonancia en el sistema. Posteriormente, en el Capítulo 6, se abordan las simulaciones y resultados obtenidos en la tesis. En la Sección 6.1, se enlistan los parámetros del sistema; mientras que en la Sección 6.2 se muestran los resultados de la simulación. Finalmente, en el Capítulo 7, se presentan las conclusiones.

# Capítulo 2

## Estados cuánticos

**Contenido: Se presentan las herramientas matemáticas básicas de los sistemas cuánticos.**

### 2.1. Definición

A raíz de los experimentos sobre la interacción entre materia y radiación (cuerpo negro, espectros químicos, efecto fotoeléctrico, entre otros [13]), se descubrió que los sistemas microscópicos no pueden ser descritos mediante física clásica. En su lugar, se desarrolló la física cuántica que describe la información experimental relacionada con los sistemas microscópicos, como bien lo describió el mismo Niels Bohr:

*The entire formalism is to be considered as a tool for deriving predictions, of definite or statistical character, as regards information obtainable under experimental conditions described in classical terms [· · · ] under well-defined experi-*

*mental conditions.*[14]

*El formalismo completo debe considerarse como una herramienta para derivar predicciones, de carácter definido o estadístico, en lo que respecta a la información obtenible bajo condiciones experimentales descritas en términos clásicos [· · ·] bajo condiciones experimentales bien definidas..*[14]

Dicho de otra manera, la física cuántica no estudia el objeto microscópico en sí, sino que describe la información experimental asociada a éste. Por esta razón, se introdujo el concepto de estado cuántico<sup>1</sup>  $|\psi(t)\rangle$ , como sigue: El estado cuántico  $|\psi(t)\rangle$  es un objeto matemático que contiene toda la información experimental extraíble de un sistema microscópico, para todo instante de tiempo  $t$ . Se puede probar que el estado cuántico es un vector perteneciente a un espacio de Hilbert [15].

Como se indicó anteriormente, los sistemas microscópicos carecen de una descripción determinista. Por este motivo, se necesita adoptar un enfoque probabilístico en física cuántica. Esto significa que, en general, las mediciones hechas sobre el sistema tendrán un resultado indeterminado; por lo cual, sólo se puede hablar de la probabilidad de detectar, por ejemplo, un valor de energía.

Sea un sistema microscópico cuya preparación experimental esté descrita en términos de mediciones de energía  $E_0, E_1, \dots$ . El estado cuántico que describe la preparación experimental de ese sistema está dado por

$$|\psi(t)\rangle = c_0(t)|0\rangle + c_1(t)|1\rangle + \dots + c_k(t)|k\rangle + \dots, \quad (2.1)$$

con  $c_0(t), c_1(t), \dots \in \mathbb{C}$ .

---

<sup>1</sup>No confundir con el estado empleado en el contexto de teoría de control.

La suma de estados indica la posible detección de los respectivos valores. Dicho de otra manera, si sumamos los estados<sup>2</sup>  $|0\rangle, |1\rangle, \dots$  significa que es posible detectar los valores de energía  $E_0, E_1, \dots$ . La probabilidad de detección  $P(E_k)$  de la energía  $E_k$  está dada por el coeficiente  $c_k$ , ver (2.1), de la siguiente manera

$$P_{E_k}(t) = |c_k(t)|^2. \quad (2.2)$$

Por otro lado, como se mencionó anteriormente, los estados cuánticos son vectores pertenecientes a un espacio de Hilbert. Por esta razón se puede definir un producto escalar. Para dos estados  $|\psi_1(t)\rangle$  y  $|\psi_2(t)\rangle$  su producto escalar está dado por el producto  $\langle\psi_1(t)|\psi_2(t)\rangle \in \mathbb{C}$ , para más detalles sobre las propiedades del producto escalar ver [16]. En particular, para los estados relacionados con detecciones de cantidades medibles, como energía, entre otros,

$$\langle k_1|k_2\rangle = \delta_{k_1,k_2} \quad (2.3)$$

donde  $\delta_{k_1,k_2} = 1$  siempre y cuando  $k_1 = k_2$ , de otra manera el resultado es cero. Esto nos permite reescribir la probabilidad de detección de valores observables. En efecto, partiendo de (2.1) y tomando en cuenta (2.3), podemos escribir  $P_{E_k}(t) = |c_k(t)|^2 = |\langle k|\psi(t)\rangle|^2$ .

Es importante notar que se puede demostrar [16] que la probabilidad de detectar una preparación experimental descrita por un estado cuántico  $|\alpha_2(t)\rangle$ , dado que el sistema se preparó experimentalmente de acuerdo al estado cuántico  $|\alpha_1(t)\rangle$  está dada por

---

<sup>2</sup>En la literatura a estos estados de energía bien definida se les conoce como “estados estacionarios”.

$$P_{|\alpha_1\rangle \rightarrow |\alpha_2\rangle} = |\langle \alpha_1(t) | \alpha_2(t) \rangle|^2. \quad (2.4)$$

A esta probabilidad se le conoce como “probabilidad de transición” entre los estados  $|\alpha_1(t)\rangle$  y  $|\alpha_2(t)\rangle$ .

## 2.2. Observables

En la Sección anterior, se describió al sistema microscópico en función de posibles eventos y sus respectivas probabilidades. Ahora bien, recordemos que la física cuántica se basa en la descripción experimental de un sistema microscópico; por lo cual, se necesita expresar los promedios de las mediciones realizadas sobre el sistema. Para ello, necesitamos un objeto matemático que esté relacionado con los medidores de cantidades físicas observables (energía, posición, momento, entre otros) que llamaremos observable<sup>3</sup>. Sea una cantidad física observable  $\mathcal{A}$ , el observable  $\hat{A}$  es el objeto matemático que contiene toda la información extraíble del medidor de dicha cantidad; es decir, los valores medibles con sus respectivas unidades,  $a_0, a_1, \dots$ . Cabe destacar que el observable de energía tiene la peculiaridad de escribirse  $\hat{H}$  por razones históricas. Se puede probar que los observables cuánticos son transformaciones lineales hermíticas sobre el espacio de Hilbert [16]. A estas transformaciones lineales también se les llama operadores.

En el contexto de la información experimental relacionada con los medidores, necesitamos expresar el promedio, que corresponden a la mejor estimación de una medición. Sea un sistema preparado experimentalmente de acuerdo al esta-

---

<sup>3</sup>Es importante recalcar que el término observable en cuántica se refiere al medidor de una cantidad experimentalmente observable; no confundir con el concepto de observabilidad en teoría de control.

do cuántico  $|\psi(t)\rangle$ . Al medir un observable  $\hat{A}$ , los valores posibles son  $a_0, a_1, \dots$ , con probabilidades de ocurrencia  $P_{a_0}, P_{a_1}, \dots$  respectivamente. El promedio  $\langle \hat{A} \rangle$  de la medición está dado por  $\langle \hat{A} \rangle = \sum_k a_k P_{a_k}$ . Tomando en cuenta la manera de calcular las probabilidades de detección (2.2), se puede demostrar que el promedio del observable  $\hat{A}$  dado que el sistema tiene un estado cuántico  $|\psi(t)\rangle$  está dado por [16],

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle. \quad (2.5)$$

Como se indicó en la cita de Bohr, los sistemas microscópicos están descritos mediante medidores clásicos. Por lo cual, una condición para fijar la estructura matemática de los sistemas cuánticos se conoce como principio de correspondencia:

El promedio de las ecuaciones dinámicas clásicas son válidas para los sistemas cuánticos. Se puede probar que esta condición se satisface si y sólo si los operadores de posición  $\hat{X}$  y momento  $\hat{P}$  no conmutan de la siguiente manera  $\hat{X}\hat{P} = \hat{P}\hat{X} + i\hbar\mathbb{I}$ . Esto se puede reescribir utilizando el conmutador  $[\hat{X}, \hat{P}] \doteq \hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}$ ; con lo cual  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar\mathbb{I}$ .

Por otro lado, debemos recordar que hay una indeterminación inherente en las mediciones de los sistemas cuánticos. Por ello, es imposible determinar con infinita precisión los valores de posición y momento de manera simultánea. Esto se conoce como la desigualdad de Heisenberg. Esta relación indica de qué manera se relacionan las incertidumbres<sup>4</sup> de las mediciones de posición  $\sigma_X$  y momento  $\sigma_P$

---

<sup>4</sup>La incertidumbre es la mejor estimación de la dispersión de los valores detectados en una medición.

$$\sigma_X \sigma_P \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.6)$$

Dicho de otra manera, las preparaciones experimentales, indicadas por el estado cuántico, están limitadas por la desigualdad de Heisenberg, donde el mínimo del producto de incertidumbres es  $\frac{\hbar}{2}$ .

### 2.3. Estados coherentes

Sea un oscilador armónico de masa  $m$  y frecuencia natural  $\omega_0$ . Clásicamente su energía total está dada por  $\mathcal{E} = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$ . Por el principio de cuantización, el operador de energía, también conocido como Hamiltoniano en la literatura, se expresa de la siguiente forma,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{X}^2. \quad (2.7)$$

Como se mencionó en la Sección anterior, el principio de correspondencia indica que el promedio de las ecuaciones dinámicas clásicas son válidas para los sistemas cuánticos. Por lo tanto, para un oscilador armónico cuántico, el comportamiento,  $\mathfrak{B}_{osc-ar}$ , de los promedios de posición  $\langle \hat{X} \rangle$  y momento  $\langle \hat{P} \rangle$ , esta definido por:

$$\begin{bmatrix} \frac{d}{dt} & m\omega_0^2 \\ -\frac{1}{m} & \frac{d}{dt} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle \hat{P} \rangle \\ \langle \hat{X} \rangle \end{bmatrix} = 0. \quad (2.8)$$

Estamos interesados en las soluciones suaves (funciones infinitamente diferenciables) no triviales de (2.8), que satisfacen el mínimo de la desigualdad de Heisen-

berg, (2.6), esto es:<sup>5</sup>

$$\mathfrak{B}_{osc-ar} \doteq \left\{ \left( \langle \hat{P} \rangle, \langle \hat{X} \rangle \right) \in C_\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R}^2) \mid \begin{bmatrix} \frac{d}{dt} & mw_0^2 \\ -\frac{1}{m} & \frac{d}{dt} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle \hat{P} \rangle \\ \langle \hat{X} \rangle \end{bmatrix} = 0 \quad \& \quad \sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2} \right\} \quad (2.9)$$

### 2.3.1. Caracterización de los estados coherentes

Para el caso de un oscilador armónico, existen operadores de descenso,  $\hat{a}$ , y de ascenso,  $\hat{a}^\dagger$ , cuyos efectos son  $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$  y  $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ , respectivamente. Los operadores de posición  $\hat{X}$  y momento  $\hat{P}$  se pueden expresar mediante los operadores de descenso,  $\hat{a}$ , y de ascenso,  $\hat{a}^\dagger$ , de la siguiente manera [16]:

$$\begin{cases} \hat{X} = \sqrt{\frac{2\hbar}{mw_0}} \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{2} \\ \hat{P} = \sqrt{2\hbar mw_0} \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{2i} \end{cases} \quad (2.10)$$

Un estado coherente,  $|\alpha\rangle$ , para el caso de un oscilador armónico, corresponde a la siguiente superposición de estados estacionarios  $\{|n\rangle\}$

$$|\alpha(t)\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha(t)|^2\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n(t)}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (2.11)$$

con  $\alpha(t) \in \mathbb{C}$ .

Recordemos que el estado coherente  $|\alpha(t)\rangle$  reproduce el comportamiento no trivial de (5.2)

---

<sup>5</sup>Dado que se está restringiendo a funciones suaves, las soluciones débiles y fuertes de (2.8) coinciden (cf. teorema 2.3.11 de [12])

$$\begin{bmatrix} \langle \widehat{P} \rangle \\ \langle \widehat{X} \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -mw_0 A \sin(w_0 t + \phi) \\ A \cos(w_0 t + \phi) \end{bmatrix}, \quad (2.12)$$

donde  $A (\neq 0)$  es la amplitud y  $\phi$  es el desfase de la oscilación promediada. Equivalentemente, podemos expresar el promedio de la posición  $\langle \widehat{X} \rangle$  mediante exponenciales complejas,

$$\langle \widehat{X} \rangle = A \frac{\exp(\mathbf{i}\phi) \exp(\mathbf{i}w_0 t) + \exp(-\mathbf{i}\phi) \exp(-\mathbf{i}w_0 t)}{2}. \quad (2.13)$$

Alternativamente, de (2.10) y (2.5), el promedio de la posición  $\langle \widehat{X} \rangle$  también se puede expresar como:

$$\langle \widehat{X} \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{mw_0}} \frac{\langle \alpha(t) | \widehat{a} | \alpha(t) \rangle + \langle \alpha(t) | \widehat{a}^\dagger | \alpha(t) \rangle}{2}. \quad (2.14)$$

Con el fin de calcular la probabilidad de transición entre dos estados coherentes, es necesario expresar primero  $\alpha(t)$  en términos de los parámetros del fasor  $(A, w_0, \phi)$ . Tomando en cuenta las dos expresiones para el promedio de la posición (2.13) y (2.14), se deduce que,

$$\begin{cases} A \exp(\mathbf{i}\phi) \exp(\mathbf{i}w_0 t) = \sqrt{\frac{2\hbar}{mw_0}} \langle \alpha(t) | \widehat{a} | \alpha(t) \rangle \\ A \exp(-\mathbf{i}\phi) \exp(-\mathbf{i}w_0 t) = \sqrt{\frac{2\hbar}{mw_0}} \langle \alpha(t) | \widehat{a}^\dagger | \alpha(t) \rangle. \end{cases} \quad (2.15)$$

Para satisfacer (2.15),  $\langle \alpha(t) | \widehat{a} | \alpha(t) \rangle = \alpha(t) \in \mathbb{C}$ . Esto quiere decir que el estado coherente  $|\alpha(t)\rangle$  es un vector propio unitario del operador  $\widehat{a}$ :

$$\widehat{a} |\alpha(t)\rangle = \alpha(t) |\alpha(t)\rangle, \quad \langle \alpha(t) | \alpha(t) \rangle = 1. \quad (2.16)$$

De esta manera, la variable  $\alpha(t)$  y los parámetros del fasor  $(A, w_0, \phi)$ , están relacionados como sigue:

$$\alpha(t) = \sqrt{\frac{mw_0}{2\hbar}} A \exp(\mathbf{i}\phi) \exp(\mathbf{i}w_0t), \quad (2.17)$$

lo cual puede reescribirse como

$$\alpha(t) = \alpha(0) \exp(\mathbf{i}w_0t), \quad (2.18)$$

con

$$\alpha(0) = \sqrt{\frac{mw_0}{2\hbar}} A \exp(\mathbf{i}\phi). \quad (2.19)$$

### 2.3.2. Producto de dos estados coherentes

Para el cálculo de la probabilidad de transición entre dos estados coherentes  $|\alpha_1(t)\rangle$  y  $|\alpha_2(t)\rangle$ , también necesitamos determinar el producto de ambos estados. Al ser estados coherentes, sus estados se expresan de la siguiente manera,

$$|\alpha_1(t)\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha_1|^2\right) \sum_{k_1=1}^{\infty} \frac{\alpha_1^{k_1}}{\sqrt{k_1!}} |k_1\rangle, \quad (2.20)$$

$$|\alpha_2(t)\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha_2|^2\right) \sum_{k_2=1}^{\infty} \frac{\alpha_2^{k_2}}{\sqrt{k_2!}} |k_2\rangle. \quad (2.21)$$

Recordemos que las variables  $\alpha_1(t)$  y  $\alpha_2(t)$  están dadas por

$$\alpha_1(t) = \sqrt{\frac{mw_0}{2\hbar}} A_1 \exp(\mathbf{i}(w_0t + \phi_1)), \quad (2.22)$$

$$\alpha_2(t) = \sqrt{\frac{mw_0}{2\hbar}} A_2 \exp(\mathbf{i}(w_0 t + \phi_2)). \quad (2.23)$$

El producto de ambos estados coherentes (2.20) y (2.21) corresponde a,

$$\langle \alpha_1(t) | \alpha_2(t) \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha_2|^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha_1|^2\right) \sum_{k_1=1}^{\infty} \sum_{k_2=1}^{\infty} \frac{(\alpha_1^*)^{k_1} (\alpha_2)^{k_2}}{\sqrt{k_1!} \sqrt{k_2!}} \langle k_1 | k_2 \rangle. \quad (2.24)$$

Dado que  $|k_1\rangle$  y  $|k_2\rangle$  son estados cuánticos de energía bien definida, entonces son ortonormales, *i.e.*  $\langle k_1 | k_2 \rangle = \delta_{k_1, k_2}$ . Por lo cual,

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1(t) | \alpha_2(t) \rangle &= \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha_2|^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha_1|^2\right) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\alpha_1^* \alpha_2)^k}{k!} \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha_2|^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha_1|^2\right) \exp(\alpha_1^* \alpha_2). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Es decir,

$$\langle \alpha_1(t) | \alpha_2(t) \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} \left(|\alpha_2|^2 - 2\alpha_1^* \alpha_2 + |\alpha_1|^2\right)\right). \quad (2.26)$$

### 2.3.3. Probabilidad de transición

Sean dos trayectorias,  $\begin{bmatrix} \langle \widehat{P}_1 \rangle \\ \langle \widehat{X}_1 \rangle \end{bmatrix}$  y  $\begin{bmatrix} \langle \widehat{P}_2 \rangle \\ \langle \widehat{X}_2 \rangle \end{bmatrix}$  soluciones no triviales de (2.26).

El diagrama de fase de cada solución sigue las trayectorias elípticas mostradas en la Figura 2.1, ver (2.12). Cada trayectoria, solución de (2.26), está determinada por el fásor  $(A, w_0, \phi)$  que determina los estados coherentes asociados.

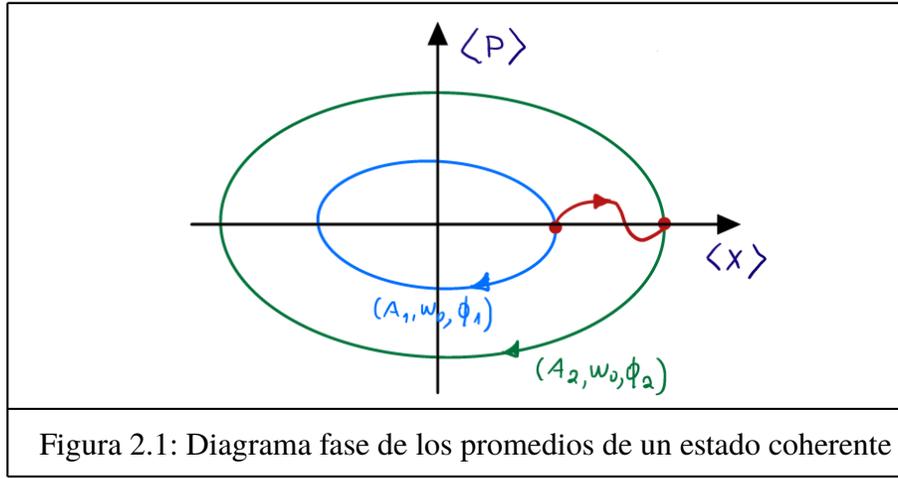


Figura 2.1: Diagrama fase de los promedios de un estado coherente

Como se mencionó en la Sección anterior, la probabilidad de transición entre los estados  $|\alpha_1(t)\rangle$  y  $|\alpha_2(t)\rangle$ , está dada por (2.4). Si tomamos en cuenta el producto (2.26), entonces, la probabilidad de transición entre dos estados coherentes es,

$$\begin{aligned}
 P_{|\alpha_1\rangle \rightarrow |\alpha_2\rangle} &= \exp\left(-(|\alpha_2|^2) - (\alpha_1\alpha_2^* + \alpha_1^*\alpha_2 + |\alpha_1|^2)\right) \\
 &= \exp\left(-(|\alpha_2|^2 - 2\text{Re}(\alpha_1^*\alpha_2)) + |\alpha_1|^2\right).
 \end{aligned}
 \tag{2.27}$$

Esto se puede reescribir mediante las tripletas  $(A_1, w_0, \phi_1)$  y  $(A_2, w_0, \phi_2)$  tomando en cuenta (2.22) y (2.23).

$$P_{|\alpha_1\rangle \rightarrow |\alpha_2\rangle} = \exp\left(-\frac{mw_0}{2\hbar} (A_2^2 - 2A_1A_2 \cos(\phi_2 - \phi_1) + A_1^2)\right). \tag{2.28}$$

# Capítulo 3

## Modelo matemático

**Contenido:** Se obtienen dos representaciones de estado desacopladas (valores medios e incertidumbres) de la molécula diatómica caracterizada mediante el potencial de Morse, sometida a la acción de un pulso láser.

Consideremos una molécula diatómica de masa reducida<sup>1</sup>  $m$ , cuyo único grado de libertad es la distancia interatómica  $q$ . La interacción interatómica está descrita por el potencial de Morse [2],

$$V_0(q) = D_0 \left( \exp(-\beta(q - q_0)) - 1 \right)^2 - D_0, \quad (3.1)$$

---

<sup>1</sup>Para una molécula de dos átomos de masas  $m_1$  y  $m_2$ , la masa reducida  $m$  de la molécula es  $\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$ . La masa reducida de la molécula puede entenderse como la masa aparente del sistema atómico.

donde  $q_0 = 1,821 [a_0]$ , es la distancia interatómica de equilibrio,  $\beta = 1,189/k_x$  [ $m^{-1}$ ] siendo el factor de escalamiento  $k_x = 0,5291 \times 10^{-10} [m/a_0]$  y  $D_0 = 0,1994k_e [J]$  donde su factor de escalamiento es  $k_e = 4,359 \times 10^{-18}$ . Cabe destacar que los coeficientes  $D_0$  y  $\beta$  están relacionados, respectivamente, con la profundidad y el ancho del potencial de Morse. La energía total de la molécula está dada entonces por  $\mathcal{E}_0 = \frac{1}{2m}p^2 + V_0(q)$  donde  $m = 2,823 \times 10^{-26} [kg]$  es la masa reducida. La molécula considerada estará sometida a la acción externa de un láser. Por simplicidad se utilizó la aproximación semiclásica. Esto implica que la interacción del láser linealmente polarizado con la molécula de momento dipolar eléctrico  $\mu$ , está dada por

$$V_{ext}(q, t) = -\epsilon(t)\mu(q) \quad (3.2)$$

con  $\epsilon(t)$ , el campo eléctrico producido por el láser. En lo que resta del trabajo, se supondrá un momento dipolar eléctrico está dado

$$\mu(q) = \mu_0 q \exp\left(-\frac{q}{q_*}\right) \quad (3.3)$$

donde  $\mu_0 = 3,088k_e [J]$  y  $q_* = 0,6 [a_0]$ .

Al cuantizar este sistema, a la posición  $q$ , al momento  $p$  y a la energía  $\mathcal{E}$  se les asocia sus respectivos operadores  $\hat{Q}$ ,  $\hat{P}$  y  $\hat{H}$ , con la condición de no conmutatividad  $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar\mathbb{I}$ . El Hamiltoniano total de la molécula está dado entonces por,

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + V(\hat{Q}, t), \quad (3.4)$$

donde  $V(\hat{Q}, t)$  es la contribución de la interacción interna de la molécula  $V_0(\hat{Q})$  y el potencial ejercido por el agente externo  $V_{ext}(\hat{Q}, t)$ , es decir,

$$V(\widehat{Q}, t) = V_0(\widehat{Q}) + V_{ext}(\widehat{Q}, t). \quad (3.5)$$

Explícitamente,

$$V_0(\widehat{Q}) = D_0 \left( \exp \left( -\beta \left( \widehat{Q} - q_0 \mathbf{1} \right) \right) - \mathbf{1} \right)^2 - D_0 \mathbf{1}, \quad (3.6)$$

$$V_{ext}(\widehat{Q}, t) = -\epsilon(t) \mu(\widehat{Q}), \quad (3.7)$$

$$\mu(\widehat{Q}) = \mu_0 \widehat{Q} \exp \left( -\frac{\widehat{Q}}{q_*} \right). \quad (3.8)$$

Recordar que el objetivo es tratar la dinámica de este sistema cuántico mediante el uso de teoría de control. Para facilitar este fin, aproximaremos  $V(\widehat{Q}, t)$  mediante una serie de Taylor truncada a segundo orden, alrededor de  $\widehat{Q}_0$ . Por lo cual,

$$V(\widehat{Q}, t) = V_0(t) \mathbf{1} + \sum_{i=1}^{\infty} V_i(t) \widehat{X}^i \approx V_0(t) \mathbf{1} + V_1(t) \widehat{X} + \frac{1}{2} V_2(t) \widehat{X}^2, \quad (3.9)$$

donde  $\widehat{X} \doteq \widehat{Q} - q_0 \mathbf{1}$ .

La expresión del coeficiente  $V_0(t)$  es

$$V_0(t) = V(\widehat{Q}, t) \Big|_{\widehat{Q}=q_0} = V_0(t) = -(D_0 + \epsilon(t) \mu_0 q_0 \exp(-\frac{q_0}{x_*})). \quad (3.10)$$

En lo que respecta  $V_1(t)$ , su expresión está dada por,

$$\begin{aligned}
V_1(t) &= \frac{\partial}{\partial \widehat{Q}} V(\widehat{Q}, t) \Big|_{\widehat{Q}=q_0} = -2\beta D_0 (\exp(-\beta(\widehat{Q} - q_0 \mathbf{1})) \\
&- \mathbf{1}) \exp(-\beta(\widehat{Q} - q_0 \mathbf{1})) - \epsilon(t) \mu_0 \left( \mathbf{1} - \frac{\widehat{Q}}{q_*} \right) \exp\left(\frac{-\widehat{Q}}{q_*}\right) \Big|_{\widehat{Q}=q_0}, \quad (3.11) \\
V_1(t) &= -\epsilon(t) \mu_0 \left( \mathbf{1} - \frac{q_0}{q_*} \right) \exp\left(-\frac{q_0}{q_*}\right).
\end{aligned}$$

Dicho de otra manera,

$$V_1(t) = \epsilon(t) \overline{V}_1, \quad (3.12)$$

donde

$$\overline{V}_1 = \mu_0 \left( \frac{q_0}{q_*} - \mathbf{1} \right) \exp\left(-\frac{q_0}{q_*}\right). \quad (3.13)$$

Finalmente,  $V_2(t)$  está dada por,

$$\begin{aligned}
V_2(t) &= \frac{\partial}{\partial \widehat{Q}^2} V(\widehat{Q}, t) \Big|_{\widehat{Q}=q_0} = \\
&= 2\beta^2 D_0 \exp(-\beta(\widehat{Q} - q_0 \mathbf{1})) (2 \exp(-\beta(\widehat{Q} - q_0 \mathbf{1})) - \mathbf{1}) + \epsilon(t) \left( \frac{\mu_0}{q_*} \right) \exp\left(-\frac{\widehat{Q}}{q_*}\right) \\
&\quad + \epsilon(t) \left( \frac{\mu_0}{q_*} \right) \left( \mathbf{1} - \frac{\widehat{Q}}{q_*} \right) \exp\left(-\frac{\widehat{Q}}{q_*}\right) \Big|_{\widehat{Q}=q_0}, \\
&= 2\beta^2 D_0 - \epsilon(t) \left( \frac{\mu_0}{q_*} \right) \left( 2 - \frac{q_0}{q_*} \right) \exp\left(-\frac{q_0}{q_*}\right). \quad (3.14)
\end{aligned}$$

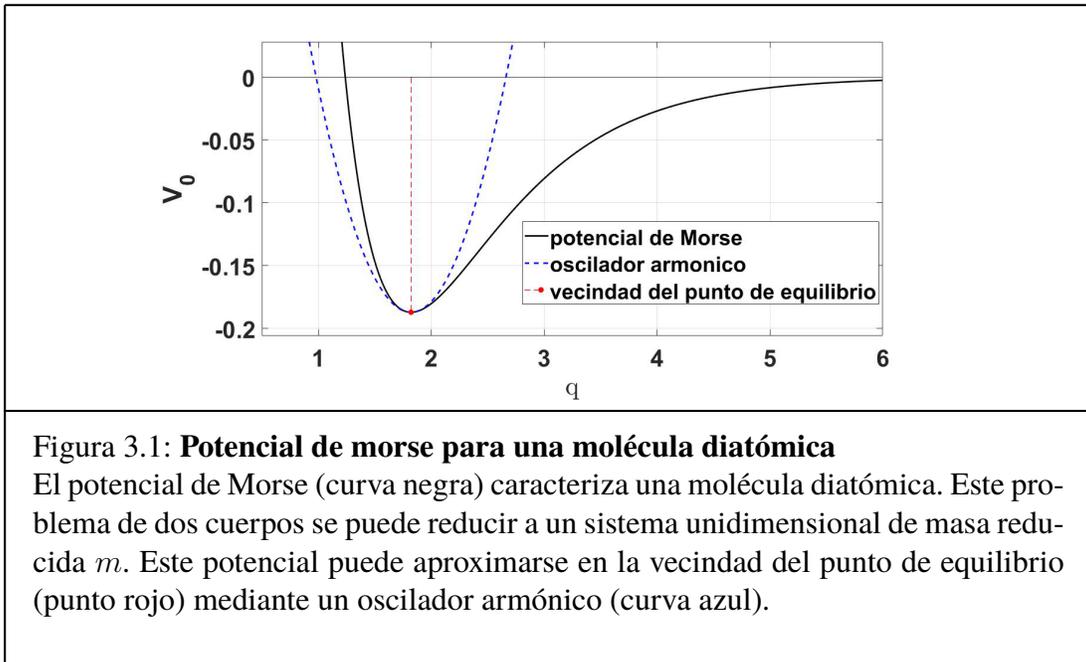
Lo cual se puede reescribir como,

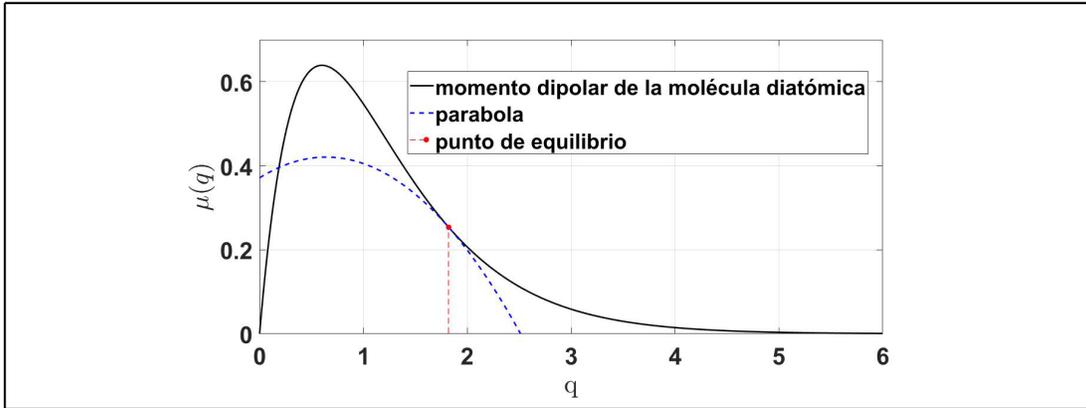
$$V_2(t) = 2\beta^2 D_0 - \epsilon(t)\bar{V}_2, \quad (3.15)$$

con

$$\bar{V}_2 = \left(\frac{\mu_0}{q_*}\right) \left(\frac{q_0}{q_*} - 2\right) \exp\left(-\frac{q_0}{q_*}\right). \quad (3.16)$$

De esta manera, se está aproximando a segundo orden el potencial de Morse y el momento dipolar eléctrico, como se ilustra en las Figuras 3.1 y 3.2, respectivamente.





**Figura 3.2: Momento dipolar eléctrico de la molécula diatómica**

En este trabajo se asume que el momento dipolar de la molécula diatómica se describe mediante (3.5) y se ilustra con la curva negra. Recuerde que el momento dipolar eléctrico se puede entender como una “inercia eléctrica” para un dipolo eléctrico. En una vecindad del punto de equilibrio (punto rojo) del momento dipolar, se puede aproximar mediante una parábola.

### 3.1. Dinámica del sistema

Como se explicó en el Capítulo anterior, el estado cuántico  $|\psi(t)\rangle$  describe la preparación experimental del sistema. De aquí en adelante se supondrá que el sistema está unívocamente descrito por una sola preparación experimental; es decir, el sistema tiene solamente un estado cuántico  $|\psi(t)\rangle$  asociado<sup>2</sup>. En este caso, la dinámica de  $|\psi(t)\rangle$  se rige por la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -i\frac{1}{\hbar}\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle, \quad |\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle, \quad (3.17)$$

donde  $\hat{H}(t)$  corresponde al Hamiltoniano total del sistema. Para obtener una repre-

<sup>2</sup>Los sistemas que tienen asociados un solo estado cuántico, se dice que están en un “estado puro”. A diferencia de los sistemas que no tienen una preparación experimental bien determinada, por lo cual tendrán varios estados cuánticos asociados; en este caso, se dice que el sistema está en un “estado mezcla”.

sentación de estado del sistema cuántico se trabajo con los momentos estadísticos del sistema, en particular, los promedios, las incertidumbres y las correlaciones de posición y momento. Por este motivo, necesitamos la ecuación dinámica de cualquier promedio.

El teorema de Ehrenfest es un teorema empleado en mecánica cuántica [17] que relaciona la derivada temporal del promedio de un observable, con el promedio de su conmutador con el operador Hamiltoniano,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \left\langle \frac{[\hat{A}, \hat{H}]}{i\hbar} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle, \quad (3.18)$$

donde  $\hat{H}$  es el operador Hamiltoniano asociado a la molécula (3.4).

Recuerde que para dos operadores  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$ , su conmutador  $[\hat{A}, \hat{B}]$  está dado por,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (3.19)$$

Tome en cuenta que los operadores de posición y momento,  $\hat{X}$  y  $\hat{P}$ , satisfacen el siguiente conmutador (*cf.* [E – 29] [c1] §II E, 2.a)

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \mathbf{1}. \quad (3.20)$$

De la definición de conmutador (3.19), si tomamos en cuenta el conmutador (3.20), entonces, podemos deducir las siguientes expresiones:

$$[\hat{P}, \hat{X}^n] = -i\hbar n \hat{X}^{n-1}, \quad [\hat{P}, \hat{P}\hat{X}] = [\hat{P}, \hat{X}\hat{P}] = -i\hbar \hat{P}, \quad (3.21)$$

$$[\hat{X}, \hat{P}^n] = i\hbar n \hat{P}^{n-1}, \quad [\hat{X}, \hat{X}\hat{P}] = [\hat{X}, \hat{P}\hat{X}] = i\hbar \hat{X}. \quad (3.22)$$

Cabe destacar que los estados propios de los operadores,  $\widehat{X}$  y  $\widehat{P}$ , se denotan, respectivamente, por  $|x\rangle$  y  $|p\rangle$ , por lo cual se obtienen las siguientes ecuaciones de valores propios:

$$\begin{cases} \widehat{X}|x\rangle = x|x\rangle, & \langle x|\widehat{X} = x\langle x| \\ \widehat{P}|p\rangle = p|p\rangle, & \langle p|\widehat{P} = p\langle p| \end{cases} \quad (3.23)$$

Por otro lado se sabe que cuando dos operadores satisfacen el conmutador (3.20), la matriz exponencial,  $\exp\left(\frac{i\delta\widehat{P}}{\hbar}\right)$  tiene por efecto una traslación en la posición,

$$\langle x|\exp\left(\frac{i\delta\widehat{P}}{\hbar}\right)|\psi\rangle = \psi(x + \delta), \quad (3.24)$$

donde  $\psi(x + \delta) = \langle x + \delta|\psi\rangle$ . Además, dado que,  $0 < \delta \ll 1$  entonces la matriz puede ser linealizada:

$$\exp\left(\frac{i\delta\widehat{P}}{\hbar}\right) = \mathbf{1} + \frac{i\delta\widehat{P}}{\hbar} + \mathcal{O}(\delta^2). \quad (3.25)$$

Entonces, sustituyendo (3.25) en (3.24), se tiene a primer orden en  $\delta$ :

$$\psi(x) + \frac{i\delta}{\hbar} \langle x|\widehat{P}|\psi\rangle = \psi(x + \delta) + \mathcal{O}(\delta^2), \quad (3.26)$$

donde  $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ . Despejando  $\langle x|\widehat{P}|\psi\rangle$  y tomando el limite,  $\delta \rightarrow 0$ , se obtiene:

$$\langle x|\widehat{P}|\psi\rangle = -i\hbar \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\psi(x + \delta) - \psi(x)}{\delta} + \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{O}(\delta) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi \quad (3.27)$$

En las secciones siguiente, aplicaremos la ecuación dinámica (3.18) para los promedios, las incertidumbres y la correlación.

### 3.2. Dinámica de los promedios $\langle \hat{X} \rangle$ y $\langle \hat{P} \rangle$

Dado que los observables de posición  $\hat{X}$  y momento  $\hat{P}$  no dependen explícitamente del tiempo  $t$ ; entonces  $\frac{\partial \hat{X}}{\partial t} = 0$  y  $\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = 0$ . Al aplicar la expresión (3.18), la dinámica del promedio de la posición  $\langle \hat{X} \rangle$  está dada por,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle &= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \langle [\hat{X}, \hat{H}] \rangle = -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \langle \left[ \hat{X}, \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{X}, t) \right] \rangle \\ &= -\frac{\mathbf{i}}{2m\hbar} \langle [\hat{X}, \hat{P}^2] \rangle = -\frac{2\mathbf{i}^2\hbar}{2m\hbar} \langle \hat{P} \rangle, \end{aligned} \quad (3.28)$$

por lo cual,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{P} \rangle. \quad (3.29)$$

En lo que concierne al promedio del momento  $\langle \hat{P} \rangle$ , procedemos análogamente,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \hat{P} \rangle &= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \langle [\hat{P}, \hat{H}] \rangle = -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \langle \left[ \hat{P}, \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{X}, t) \right] \rangle \\
&= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \langle [\hat{P}, V(\hat{X}, t)] \rangle = -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \langle \left[ \hat{P}, V_0(t)\mathbb{I} + V_1(t)\hat{X} + \frac{1}{2}V_2(t)\hat{X}^2 \right] \rangle \\
&= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left( V_1(t) \langle [\hat{P}, \hat{X}] \rangle + \frac{1}{2}V_2(t) \langle [\hat{P}, \hat{X}^2] \rangle \right) \\
&= +\frac{\mathbf{i}^2 \hbar}{\hbar} V_1(t) + 2\frac{\mathbf{i}^2}{\hbar} \frac{1}{2} V_2(t) \langle \hat{X} \rangle, \tag{3.30}
\end{aligned}$$

es decir,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P} \rangle = -V_2(t) \langle \hat{X} \rangle - V_1(t). \tag{3.31}$$

Tomando en cuenta (3.12) y (3.15), la dinámica del promedio del momento toma la siguiente forma,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P} \rangle = \left( -2\beta^2 D_0 + \epsilon(t) \bar{V}_2 \right) \langle \hat{X} \rangle - \epsilon(t) \bar{V}_1. \tag{3.32}$$

### 3.3. Dinámica de las incertidumbres $\sigma_X$ y $\sigma_P$ , y la correlación $\sigma_{XP}$

Ahora se procede a calcular la dinámica de la incertidumbre de posición  $\sigma_X$  y momento  $\sigma_P$ , así como la correlación entre posición y momento  $\sigma_{XP}$ . Tome en cuenta que, por definición

$$\sigma_P^2(t) = \langle \hat{P}^2 \rangle (t) - \langle \hat{P} \rangle^2 (t), \quad (3.33)$$

$$\sigma_X^2(t) = \langle \hat{X}^2 \rangle (t) - \langle \hat{X} \rangle^2 (t), \quad (3.34)$$

$$\sigma_{XP}(t) = \left\langle \frac{(\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X})}{2} \right\rangle - \langle \hat{X} \rangle \langle \hat{P} \rangle. \quad (3.35)$$

**(a) Incertidumbre del momento  $\sigma_P$ .** Para el cálculo de la incertidumbre, primero debemos determinar el promedio del cuadrado del momento  $\langle \hat{P}^2 \rangle$  aplicando la expresión (3.18).

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{P}^2 \rangle &= -i \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left\langle \left[ \hat{P}^2, \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{X}, t) \right] \right\rangle = -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left\langle \left[ \hat{P}^2, V_1(t)\hat{X} + \frac{1}{2}V_2(t)\hat{X}^2 \right] \right\rangle, \\ &= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} V_1(t) \langle [\hat{P}^2, \hat{X}] \rangle - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2} V_2(t) \langle [\hat{P}^2, \hat{X}] \hat{X} - \hat{X} [\hat{X}, \hat{P}^2] \rangle, \\ &= \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \mathbf{i} \hbar 2 V_1(t) \langle \hat{P} \rangle - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2} V_2(t) (-\mathbf{i} \hbar 2) \langle \hat{P}\hat{X} + \hat{X}\hat{P} \rangle, \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}^2 \rangle = -2V_1(t) \langle \hat{P} \rangle - 2V_2(t) \left\langle \frac{(\hat{P}\hat{X} + \hat{X}\hat{P})}{2} \right\rangle. \quad (3.37)$$

Para calcular la dinámica de la incertidumbre  $\sigma_P$ , recordemos su definición (3.33). Al tomar en cuenta (3.37), la derivada del promedio del momento (3.31), así como la definición de la correlación (3.35), se obtiene:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\sigma_P^2(t) &= \frac{d}{dt}\langle\hat{P}^2\rangle - 2\langle\hat{P}\rangle\frac{d}{dt}\langle\hat{P}\rangle \\
&= -2V_1(t)\langle\hat{P}\rangle - 2V_2(t)\left\langle\frac{(\hat{P}\hat{X} + \hat{X}\hat{P})}{2}\right\rangle - 2\langle\hat{P}\rangle(-V_2(t)\langle\hat{X}\rangle - V_1(t)) \\
&= -2V_2(t)\left(\left\langle\frac{(\hat{P}\hat{X} + \hat{X}\hat{P})}{2}\right\rangle - \langle\hat{P}\rangle\langle\hat{X}\rangle\right). \tag{3.38}
\end{aligned}$$

Es decir,

$$\frac{d}{dt}\sigma_P^2(t) = -2V_2(t)\sigma_{XP}(t). \tag{3.39}$$

Al recordar la expresión (3.15) del coeficiente  $V_2(t)$ , la ecuación dinámica toma la siguiente forma:

$$\frac{d}{dt}\sigma_P^2(t) = -2\left(2\beta^2 D_0 - \epsilon(t)\overline{V_2}\right)\sigma_{XP}(t). \tag{3.40}$$

**(b) Incertidumbre de la posición  $\sigma_X$ .** Para el cálculo de la incertidumbre, primero debemos determinar el promedio del cuadrado de la posición  $\langle\hat{X}^2\rangle$  aplicando la expresión (3.18).

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \hat{X}^2 \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \left\langle \left[ \hat{X}^2, \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{X}, t) \right] \right\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \left\langle [\hat{X}^2, \hat{P}^2] \right\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} \left\langle \hat{X} [\hat{X}, \hat{P}^2] + [\hat{X}, \hat{P}^2] \hat{X} \right\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} (i\hbar^2) \left\langle \hat{X} \hat{P} + \hat{P} \hat{X} \right\rangle. \tag{3.41}
\end{aligned}$$

Dicho de otra manera,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{X}^2 \rangle = \frac{2}{m} \left( \frac{\langle \hat{X} \hat{P} + \hat{P} \hat{X} \rangle}{2} \right). \tag{3.42}$$

Para calcular la dinámica de la incertidumbre  $\sigma_X$ , recordemos su definición (3.34). Al tomar en cuenta (3.42), la derivada del promedio de la posición (3.29), así como la definición de la correlación (3.35), se obtiene:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \sigma_X^2(t) &= \frac{d}{dt} \langle \hat{X}^2 \rangle - 2 \langle \hat{X} \rangle \frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle \\
&= \frac{2}{m} \left( \frac{\langle \hat{X} \hat{P} + \hat{P} \hat{X} \rangle}{2} \right) - 2 \langle \hat{X} \rangle \frac{1}{m} \langle \hat{P} \rangle \\
\frac{d}{dt} \sigma_X^2(t) &= \frac{2}{m} \sigma_{XP}(t). \tag{3.43}
\end{aligned}$$

**(c) Correlación  $\sigma_{XP}$  entre la posición y el momento.** Para el cálculo de la correlación, primero debemos determinar el promedio de los productos entre posición y momento  $\langle \hat{X} \hat{P} \rangle$ ,  $\langle \hat{P} \hat{X} \rangle$  y  $\langle \hat{X} \rangle \langle \hat{P} \rangle$  aplicando la expresión (3.18). Empecemos con-

siderando  $\langle \widehat{X}\widehat{P} \rangle$ .

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \widehat{X}\widehat{P} \rangle &= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left\langle \left[ \widehat{X}\widehat{P}, \frac{1}{2m} \widehat{P}^2 + V(\widehat{X}, t) \right] \right\rangle \\
&= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2m} \left\langle \left[ \widehat{X}\widehat{P}, \widehat{P}^2 \right] \right\rangle - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} V_1(t) \left\langle \left[ \widehat{X}\widehat{P}, \widehat{X} \right] \right\rangle - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2} V_2(t) \left\langle \left[ \widehat{X}\widehat{P}, \widehat{X}^2 \right] \right\rangle \\
&= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2m} \left\langle \left[ \widehat{X}\widehat{P}, \widehat{P} \right] \widehat{P} + \widehat{P} \left[ \widehat{X}\widehat{P}, \widehat{P} \right] \right\rangle - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} V_1(t) (-\mathbf{i}\hbar) \langle \widehat{X} \rangle \\
&\quad - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2} V_2(t) \left\langle \left[ \widehat{P}\widehat{X}, \widehat{X} \right] \widehat{X} + \widehat{X} \left[ \widehat{P}\widehat{X}, \widehat{X} \right] \right\rangle \\
&= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2m} (\mathbf{i}\hbar) 2 \langle \widehat{P}^2 \rangle - V_1(t) \langle \widehat{X} \rangle - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2} V_2(t) (-\mathbf{i}\hbar) 2 \langle \widehat{X}^2 \rangle. \tag{3.44}
\end{aligned}$$

Por lo cual,

$$\frac{d}{dt} \langle \widehat{X}\widehat{P} \rangle = \frac{1}{m} \langle \widehat{P} \rangle^2 - V_1(t) \langle \widehat{X} \rangle - V_2(t) \langle \widehat{X} \rangle^2. \tag{3.45}$$

Procedamos análogamente con el producto  $\langle \widehat{P}\widehat{X} \rangle$ .

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \widehat{P}\widehat{X} \rangle &= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \left\langle \left[ \widehat{P}\widehat{X}, \frac{1}{2m} \widehat{P}^2 + V(\widehat{X}, t) \right] \right\rangle \\
&= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2m} \left\langle \left[ \widehat{P}\widehat{X}, \widehat{P}^2 \right] \right\rangle - \frac{1}{\hbar} V_1(t) \left\langle \left[ \widehat{P}\widehat{X}, \widehat{X} \right] \right\rangle - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2} V_2(t) \left\langle \left[ \widehat{P}\widehat{X}, \widehat{X}^2 \right] \right\rangle \\
&= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2m} \left\langle \left[ \widehat{P}\widehat{X}, \widehat{P} \right] \widehat{P} + \widehat{P} \left[ \widehat{P}\widehat{X}, \widehat{P} \right] \right\rangle - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} V_1(t) (-\mathbf{i}\hbar) \langle \widehat{X} \rangle \\
&\quad - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2} V_2(t) \left\langle \left[ \widehat{P}\widehat{X}, \widehat{X} \right] \widehat{X} + \widehat{X} \left[ \widehat{P}\widehat{X}, \widehat{X} \right] \right\rangle \\
&= -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2m} (\mathbf{i}\hbar) 2 \langle \widehat{P} \rangle - V_1(t) \langle \widehat{X} \rangle - \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \frac{1}{2} V_2(t) (-\mathbf{i}\hbar) 2 \langle \widehat{X}^2 \rangle, \tag{3.46}
\end{aligned}$$

entonces,

$$\frac{d}{dt} \langle \widehat{P} \widehat{X} \rangle = \frac{1}{m} \langle \widehat{P} \rangle - V_1(t) \langle \widehat{X} \rangle - V_2(t) \langle \widehat{X} \rangle^2. \quad (3.47)$$

Finalmente, determinemos el producto  $\langle \widehat{X} \rangle \langle \widehat{P} \rangle$ , tomando las expresiones de la derivada del promedio de posición (3.29) y momento (3.31).

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left( \langle \widehat{X} \rangle \langle \widehat{P} \rangle \right) &= \langle \widehat{X} \rangle \frac{d}{dt} \langle \widehat{P} \rangle + \left( \frac{d}{dt} \langle \widehat{X} \rangle \right) \langle \widehat{P} \rangle \\ &= \langle \widehat{X} \rangle \left( -V_2(t) \langle \widehat{X} \rangle - V_1(t) \right) + \left( \frac{1}{m} \langle \widehat{P} \rangle \right) \langle \widehat{P} \rangle, \end{aligned} \quad (3.48)$$

y tras reacomodar términos,

$$\frac{d}{dt} \left( \langle \widehat{X} \rangle \langle \widehat{P} \rangle \right) = -V_2(t) \langle \widehat{X} \rangle^2 - V_1(t) \langle \widehat{X} \rangle + \frac{1}{m} \langle \widehat{P} \rangle^2. \quad (3.49)$$

Ahora, de la definición de correlación  $\sigma_{XP}$  (3.35), expresaremos su derivada temporal. Para ello, tomemos la derivadas antes calculadas (3.45), (3.47) y (3.49). Tras sustituir dichas expresiones en la derivada de  $\sigma_{XP}$ , obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sigma_{XP}(t) &= \frac{1}{m} \langle \widehat{P}^2 \rangle - V_1(t) \langle \widehat{X} \rangle - V_2(t) \langle \widehat{X} \rangle^2 \\ &\quad - \left( \frac{1}{m} \langle \widehat{P} \rangle^2 - V_1(t) \langle \widehat{X} \rangle - V_2(t) \langle \widehat{X} \rangle^2 \right), \end{aligned} \quad (3.50)$$

tomando en cuenta la definición de la incertidumbre de momento (3.33) y posición (3.34),

$$\frac{d}{dt} \sigma_{XP}(t) = \frac{1}{m} \sigma_P^2(t) - \left( 2\beta^2 D_0 - \epsilon(t) \overline{V}_2 \right) \sigma_X^2(t). \quad (3.51)$$

## 3.4. Representaciones de estado

### 3.4.1. Representación de estado de los promedios $\langle \widehat{X} \rangle$ y $\langle \widehat{P} \rangle$

Dadas las ecuaciones dinámicas del promedio de la posición (3.29) y momento (3.32), se tiene la siguiente representación de estado.

$$\frac{d}{dt} \vec{x} = \left( A_0 + \bar{A}_1 u(t) \right) \vec{x} + B u(t), \quad (3.52)$$

donde la ley de control  $u(t)$  y el estado  $\vec{x}$  son, respectivamente,

$$u(t) = -\epsilon(t), \quad \vec{x} = \begin{bmatrix} \langle \widehat{P} \rangle \\ \langle \widehat{X} \rangle \end{bmatrix}, \quad (3.53)$$

y las matrices  $A_0$ ,  $\bar{A}_1$  y  $B_0$  están dadas como sigue,

$$A_0 = \begin{bmatrix} 0 & -m w_0^2 \\ \frac{1}{m} & 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{A}_1 = \begin{bmatrix} 0 & -m \bar{w}_1^2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad B_0 = \begin{bmatrix} b_0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.54)$$

con,

$$w_0 = \beta \sqrt{2 \frac{D_0}{m}}, \quad \bar{w}_1 = \sqrt{\frac{\bar{V}_2}{m}}, \quad b_0 = \bar{V}_1. \quad (3.55)$$

La representación de estado (3.52) define el siguiente comportamiento del vector de promedios,  $\vec{x} = \left[ \langle \widehat{P} \rangle \quad \langle \widehat{X} \rangle \right]^T$ , dada una condición inicial,  $\vec{x}(0) = \vec{x}_0 \in \mathbb{R}^2$ , y un tiempo finito,  $T \in \mathbb{R}^+$ ,

$$\begin{aligned}
\mathfrak{B}_{i/s}(\vec{x}_0, T) &\doteq \left\{ (u, \vec{x}) \in C_\infty([0, T], \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2) \mid \right. \\
&\text{dada } u(\cdot) \in C_\infty([0, T], \mathbb{R}) \exists \text{ una trayectoria suave,} \\
&\left. \vec{x}(\cdot) \in C_\infty([0, T], \mathbb{R}^2), \vec{x}(0) = \vec{x}_0, \text{ solución de (3.52)} \right\}
\end{aligned} \tag{3.56}$$

### 3.4.2. Representación de estado de las incertidumbres, $\sigma_X^2$ y $\sigma_P^2$ y la correlación $\sigma_{XP}$

Tomando en cuenta la dinámica de la incertidumbre de posición (3.40) y momento (3.43), así como la correlación entre posición y momento (3.51); entonces, directamente se obtiene la siguiente representación de estado.

$$\frac{d}{dt} \vec{x}_\sigma = \left( A_{\sigma_0} + \bar{A}_{\sigma_1} u(t) \right) \vec{x}_\sigma, \tag{3.57}$$

donde el estado  $\vec{x}_\sigma$  está dado por,

$$\vec{x}_\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_P^2 \\ \sigma_X^2 \\ \sigma_{XP} \end{bmatrix}, \tag{3.58}$$

y las matrices  $A_0$ ,  $\bar{A}_1$  y  $B_0$  están dada como sigue

$$A_{\sigma_0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -2mw_0^2 \\ 0 & 0 & \frac{2}{m} \\ \frac{1}{m} & -mw_0^2 & 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{A}_{\sigma_1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -2m\bar{w}_1^2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -m\bar{w}_1^2 & 0 \end{bmatrix}. \tag{3.59}$$

La representación de estado (3.57) define el siguiente comportamiento del vector de incertidumbres,  $\vec{x}_\sigma = [\sigma_p^2 \ \sigma_x^2 \ \sigma_{xp}]^T$ , dada una condición inicial,  $\vec{x}_\sigma(0) = \vec{x}_{\sigma,0} \in \mathbb{R}^3$ , y un tiempo finito,  $T \in \mathbb{R}^+$ ,

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}_\sigma(\vec{x}_{\sigma 0}, T) \doteq & \left\{ (u, \vec{x}_\sigma) \in C_\infty([0, T], \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3) \mid \right. \\ & \text{dada } u(\cdot) \in C_\infty([0, T], \mathbb{R}) \exists \text{ una trayectoria suave,} \\ & \left. \vec{x}_\sigma(\cdot) \in C_\infty([0, T], \mathbb{R}^3), \vec{x}_\sigma(0) = \vec{x}_{\sigma 0}, \text{ solución de (3.57)} \right\} \end{aligned} \quad (3.60)$$

Se asumirán condiciones iniciales coherentes descorrelacionadas,  $\vec{x}_{\sigma 0} = \left[ \frac{(\frac{\hbar}{2})^2}{\sigma_{x0}^2} \ \sigma_{x0}^2 \ 0 \right]^T$ , siendo  $\sigma_{x0} \in \mathbb{R}^+$ , una condición inicial dada.

# Capítulo 4

## Regulador cuadrático lineal: tiempo finito

**Contenido:** Se realiza un ejemplo académico aplicando el regulador cuadrático lineal

### 4.1. Problema de control óptimo

Sea un sistema dinámico representado por la ecuación diferencial

$$\frac{d}{dt} \vec{x}(t) = f(\vec{x}, u, t), \quad (4.1)$$

con un estado  $\vec{x}(t) \in \mathbb{R}^n$  y una entrada de control  $u(t) \in \mathbb{R}$ . Se desea resolver el siguiente problema:

**Problema.** Alcanzar una referencia  $\vec{x}_f$ , en tiempo finito,  $T$ , minimizando la siguiente funcional del costo

$$J = \frac{1}{2} (\vec{x}(T) - \vec{x}_f)^T S (\vec{x}(T) - \vec{x}_f) + \frac{1}{2} \int_0^t u^2(\tau) d\tau, \quad (4.2)$$

donde  $S$  es una matriz simétrica positiva semi definida.

Este es un problema clásico de control óptimo. Su resolución está descrita detalladamente en [3]. En la Tabla 4.1, se resumen los pasos para el tratamiento de este problema.

A. Modelo del sistema	$\frac{d}{dt} \vec{x} = f(\vec{x}, u, t), \quad t \geq 0 \quad \vec{x}(0) = \vec{x}_0$
B. Funcional	$J = \phi(x(T), T) + \int_0^T L(x, u, t) dt$
C. Función Hamiltoniano del controlador óptimo	$H(\vec{x}, u, t) = L(\vec{x}, u, t) + \vec{\zeta}^T \vec{f}(\vec{x}, u, t)$
D. Ecuación de estado	$\frac{d}{dt} \vec{x} = \frac{\partial H}{\partial \zeta} = \vec{f}, \quad t \geq 0$
E. Ecuación de coestado	$-\frac{d}{dt} \vec{\zeta} = \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial \vec{f}^T}{\partial x} \vec{\zeta} + \frac{\partial L}{\partial x}$
F. Condición estacionaria	$0 = \frac{\partial H}{\partial u} = \frac{\partial L}{\partial u} + \frac{\partial \vec{f}^T}{\partial u} \vec{\zeta}$
G. Condiciones de frontera	$\vec{x}_0, \text{ dado}$ $(\vec{\phi}_x - \vec{\zeta}) _T dx(T) + (\phi_t + H) _T dT = 0$

Tabla 4.1: Pasos para implementar un controlador óptimo no lineal continuo con función de estado fijo final, Tabla 3.2-1 extraída de [3].

A fin de ilustrar el procedimiento de minimización, descrito en la Tabla 4.1, en la siguiente Sección estudiaremos un ejemplo académico.

## 4.2. Ejemplo académico extraído de [3]

Considérese un cuarto a temperatura  $\theta(t)$  [ $^{\circ}C$ ] interactuando térmicamente con el medio ambiente que se encuentra a temperatura  $\theta_0$ . En el interior del cuarto, se encuentra una fuente de calor  $u(t)$  [ $J$ ]. Se desea incrementar la temperatura del cuarto, partiendo de una temperatura inicial  $\theta_0$  hasta una temperatura final  $\theta_0 + \theta_* = 10$  [ $^{\circ}C$ ], en un tiempo finito  $T = 10$  [ $s$ ], utilizando mínima energía, ver Figura 4.1. La dinámica del sistema está regida por la **ley de enfriamiento de Newton**:

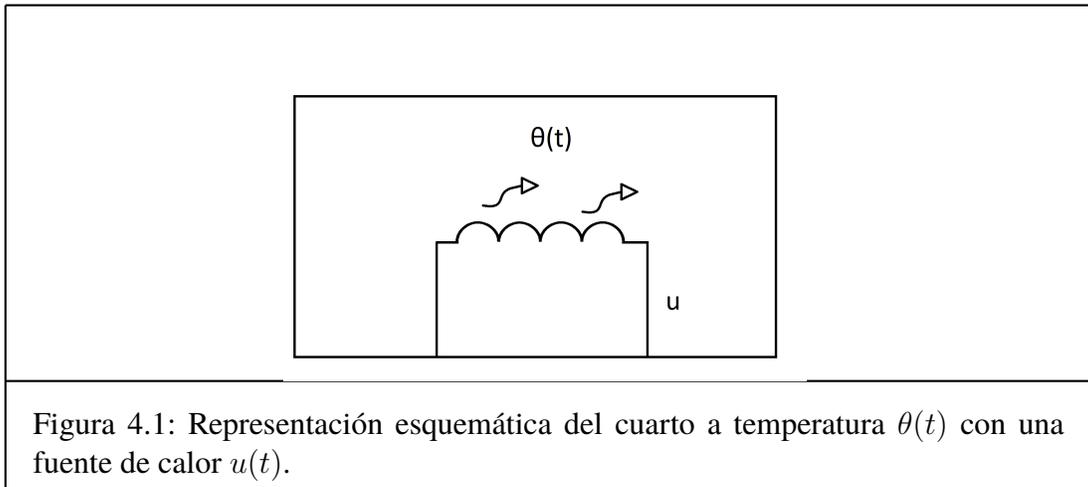


Figura 4.1: Representación esquemática del cuarto a temperatura  $\theta(t)$  con una fuente de calor  $u(t)$ .

$$\frac{d}{dt}x = -ax + bu, \quad (4.3)$$

donde  $x = \theta - \theta_0$  denota la diferencia de temperaturas entre el cuarto y el medio ambiente;  $a$  [ $s^{-1}$ ] es la constante de transferencia de calor y  $b$  [ $^{\circ}C/Js$ ] es la ganancia de transferencia de calor. Recordando (4.1), notamos que para la ecuación (4.3),  $f(x, u) = -ax + bu$  y  $x(0) = 0$ .

Se consideran los siguientes dos casos:

**Caso (1) Estado de frontera fija.** Para este caso se considera la siguiente funcional de costo:

$$J_1 = \frac{1}{2} \int_0^T u^2(t) dt, \quad (4.4)$$

y se quiere obtener

$$x(T) = x_*, \quad (4.5)$$

donde  $x_* = \theta_* - \theta_0$ .

**Caso (2) Estado de frontera libre.** Para este caso, se considera la siguiente funcional de costo:

$$J_2 = \frac{1}{2} s (x(T) - x_*)^2 + \frac{1}{2} \int_0^T u^2(t) dt, \quad (4.6)$$

donde  $s$  es un parámetro de ponderación positivo.

### 4.2.1. Ley de Control Óptimo

A continuación se explica en que consisten los pasos de la Tabla 4.1, para la resolución del problema de control óptimo planteado al principio de este Capítulo.

**(C) Función Hamiltoniana  $H$ .** Para los casos (1) y (2), el Lagrangiano está dado por  $\mathcal{L}(u, t) = \left(\frac{1}{2}\right) u^2(t)$ ; por lo que la función Hamiltoniana es (ver Tabla 4.1 paso C y (4.3))

$$H(x, u, t) = \frac{1}{2} u^2 + \zeta (ax + bu), \quad (4.7)$$

donde  $\zeta$  es el coestado.

**(E) Ecuación del coestado  $\zeta$ .** El coestado está representado por la siguiente ecuación (ver (E),(4.7) y (C)):

$$\frac{d}{dt}\zeta = a\zeta. \quad (4.8)$$

De (4.8) se sigue que las trayectorias solución de (4.8) están dadas por:<sup>1</sup>

$$\zeta(t) = \exp(-a(T-t))\zeta(T) \quad (4.9)$$

donde  $\zeta(T)$  es el estado frontera del coestado.

**(G) ley de control óptima.** La ley de control óptima,  $u_*$ , se determina de la condición estacionaria (F). En efecto, tomando en cuenta la función Hamiltoniana (4.7) y la dinámica del sistema (4.3) en (F), se sigue que:

$$u_* + b\zeta = 0. \quad (4.10)$$

Al sustituir el coestado (4.9) en (4.10), la ley de control óptima toma la siguiente forma:

$$u_* = -b \exp(-a(T-t))\zeta(T). \quad (4.11)$$

Para finalizar con la determinación de la ley de control óptima, se necesita inferir la condición final del coestado  $\zeta(T)$ . A continuación, se describirá la manera de determinar  $\zeta(T)$  para los casos (1) y (2).

---

<sup>1</sup>Note que el Lagrangiano no depende explícitamente de  $x$ , por lo cual  $\partial L/\partial x = 0$ .

### 4.2.2. Caso (1) estado de frontera fija

Sustituyendo la ley de control óptima (4.11) en el sistema representado por la ecuación de estado (4.3), se obtiene la siguiente trayectoria solución:

$$\begin{aligned}
 x(t) &= \exp(-at)x(0) + \int_0^t \exp(-a(t-\tau))bu_*(\tau)d\tau \\
 &= \exp(-at)x(0) - \int_0^t \exp(-a(t-\tau))b^2 \exp(-a(T-\tau))\zeta(T)d\tau \\
 &= \exp(-at)x(0) - b^2 \int_0^t \exp(-a(T+t-2\tau))d\tau\zeta(T) \\
 &= \exp(-at)x(0) - \frac{b^2}{2a} (\exp(-a(T-t)) - \exp(-a(T+t))) \zeta(T), \\
 x(t) &= \exp(-at)x(0) - \frac{b^2}{a} \exp(-aT) \sinh(at)\zeta(T). \tag{4.12}
 \end{aligned}$$

Dado que se tiene el estado de frontera fija  $x(T) = x_*$ , entonces la trayectoria solución (4.12) implica la siguiente condición final del coestado:

$$\zeta(T) = -\frac{a(x_* - \exp(-aT)x(0))}{b^2 \sinh(aT)} \exp(aT). \tag{4.13}$$

Al tomar en cuenta la expresión de  $u_*$  (4.11) y la condición final del coestado (4.13), la ley de control óptima para el coestado de frontera fija es:

$$u_* = \frac{a(x_* - \exp(-aT)x(0))}{b \sinh(aT)} \exp(at), \quad t \in [0, T]. \tag{4.14}$$

### 4.2.3. Caso (2) estado de frontera libre

Para el caso de un estado de frontera libre, el estado de frontera del coestado,  $\zeta(T)$ , se determina con la ayuda de la condición de frontera (C). De la funcional de costo (4.6), se tiene que la función  $\phi$  del criterio (B) de la tabla 4.1 es:

$$\phi = \frac{1}{2}s (x(T) - x_*)^2. \quad (4.15)$$

Por lo que:

$$\phi_x \Big|_{t=T} = \frac{\partial}{\partial x(T)} \phi = s (x(T) - x_*). \quad (4.16)$$

Al sustituir (4.16) en la condición de frontera (G), se obtiene:<sup>2</sup>

$$s (x(T) - x_*) - \zeta(T) = 0. \quad (4.17)$$

Una vez que se sustituye la condición final del coestado (4.17) en la trayectoria solución (4.12), se deduce que:

$$\frac{\zeta(T)}{s} + x_* = \exp(-aT)x(0) - \frac{b^2}{a} \exp(-aT) \sinh(aT)\zeta(T), \quad (4.18)$$

es decir la condición final del coestado toma la siguiente forma ,

$$\zeta(T) = \frac{-(x_* - \exp(aT)x(0)) a \exp(aT)}{(\frac{a}{s} \exp(aT) + b^2 \sinh(aT))}. \quad (4.19)$$

Sustituyendo la condición final del coestado (4.19) en  $u_*$  (4.11), la ley de control

---

<sup>2</sup>Dado que el tiempo final es fijo, entonces  $dT=0$  .

óptima para el coestado de frontera libre es:

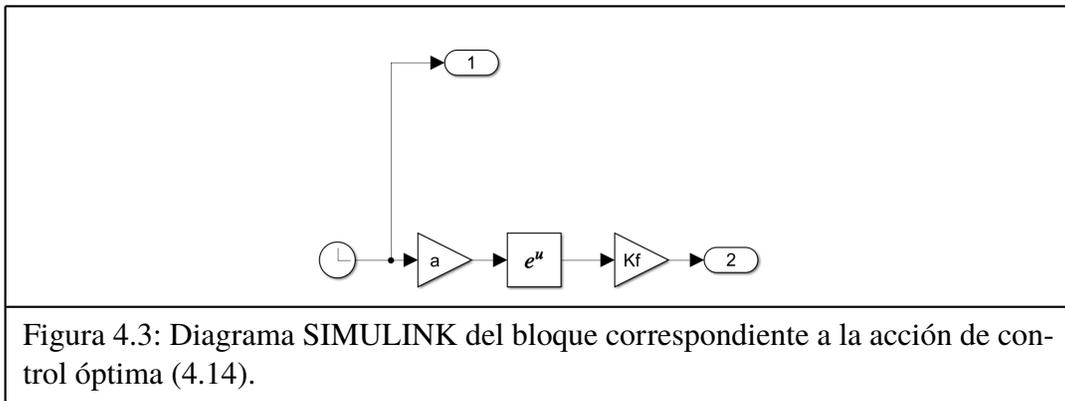
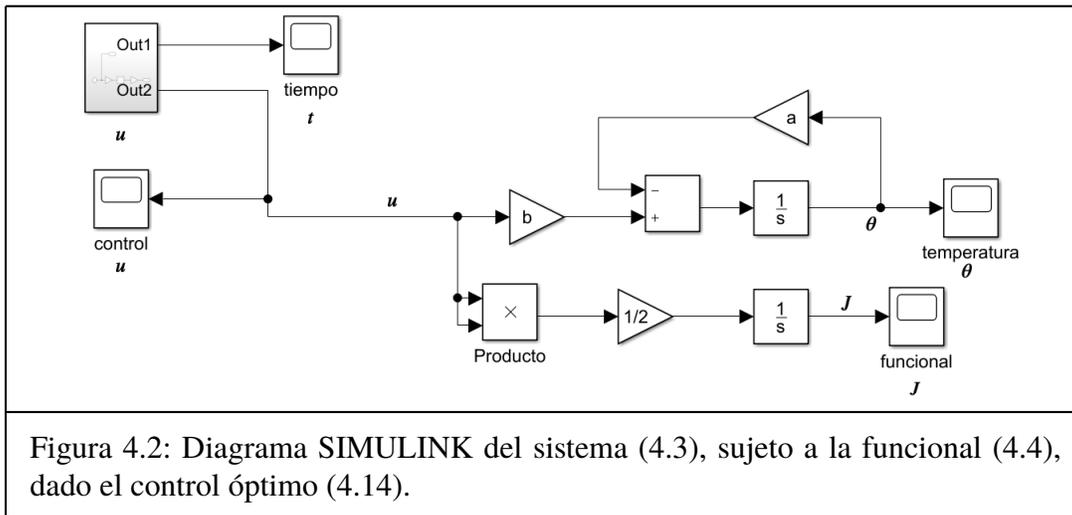
$$u_* = \frac{(x_* - e^{-aT}x(0))ae^{at}}{\left(\frac{a}{bs}\right)e^{aT} + b\sinh(aT)}. \quad (4.20)$$

Cabe destacar que si comparamos la ley de control óptima  $u_*$  y la condición final del coestado  $\zeta(T)$ , respectivamente, para el caso (1) (ver (4.20) y (4.19)) y el caso (2) (ver (4.14) y (4.13)), podemos observar que cuando  $s \rightarrow \infty$ , se obtiene el caso (1), es decir, estado de frontera fija. También, debemos notar que

$$\lim_{s \rightarrow \infty} x(T) = x_*.$$

#### 4.2.4. Resultados de simulación

**Caso (1) estado de frontera fija.** Sea el sistema descrito en la Sección 4.2. El diagrama a bloques de la dinámica asociada se presenta en la Figura 4.2. Así mismo, el bloque interno de la acción de control  $u$  se muestra esquemáticamente en la Figura 4.3.



Cabe señalar que el comportamiento de  $\theta(t)$  fue el esperado, ver Figura 4.6, ya que después de 10 [s], llegó a 10 [°C], como se planteó al principio de la Sección 4.2.

Además, se observó que la funcional de costo  $J$  se comporta de manera exponencial, como se ilustra en la Figura 4.7. Por último, la ley de control óptima  $u_*$ , se presenta en la Figura 4.8.

**Caso (2) estado de frontera libre.** Continuamos considerando el sistema descrito en la Sección 4.2. No obstante, tratamos ahora el caso del estado con frontera libre. El diagrama a bloques de la dinámica asociada se presenta en la Figura 4.4. Así mismo, el bloque interno de la acción de control  $u$  se muestra esquemáticamente en la Figura 4.5.

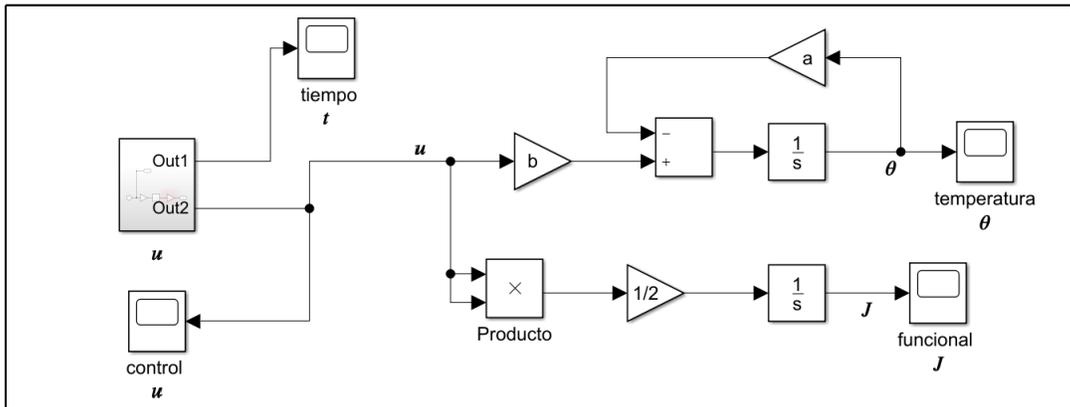


Figura 4.4: Diagrama SIMULINK del sistema (4.3), sujeto a la funcional (4.4), dado el control óptimo (4.14).

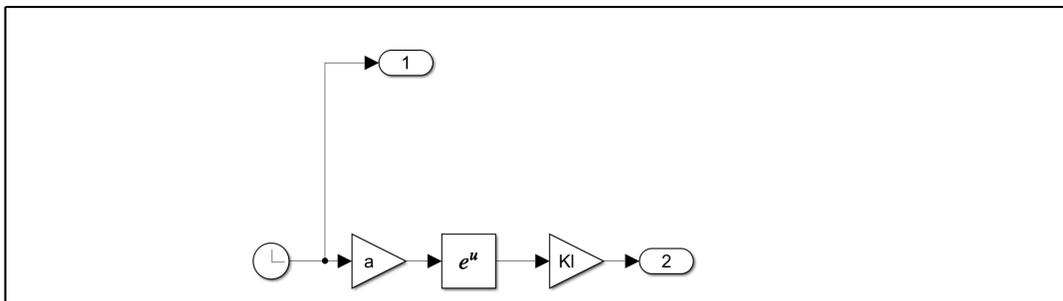


Figura 4.5: Diagrama SIMULINK del bloque correspondiente a la acción de control óptima (4.20).

Cabe señalar que, para el caso del estado de frontera libre, el comportamiento depende del valor del coeficiente de ponderación  $s$ . En particular, simulamos el

comportamiento de  $\theta(t)$ , la funcional de costo  $J$  y la ley de control óptima  $u_*$ , respectivamente, para  $s = 10$  (ver Figuras 4.6, 4.7 y 4.8). Es importante mencionar que cuanto mayor es el valor del coeficiente de ponderación, más parecido es el comportamiento del caso (1) al del caso (2).

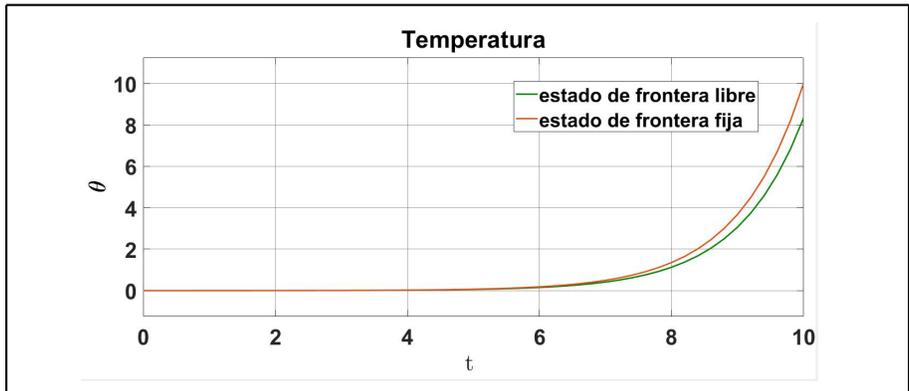


Figura 4.6: Temperatura  $\theta(t)$ , en función del tiempo  $t \in [0, 10]$ .

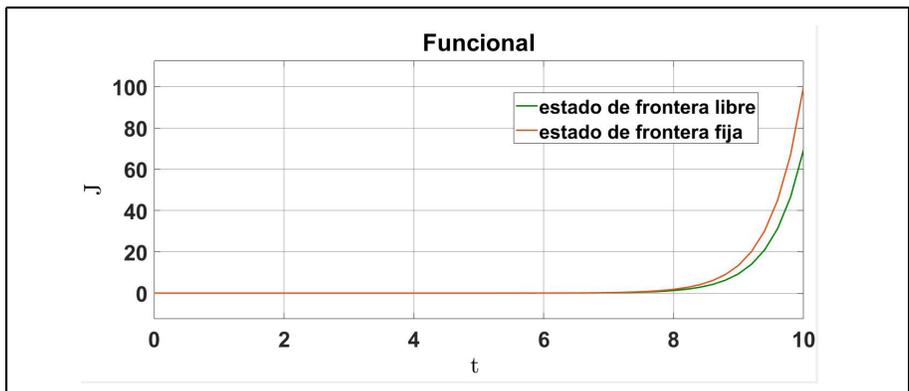


Figura 4.7: Funcional de costo  $J$  (4.4), en función del tiempo  $t \in [0, 10]$

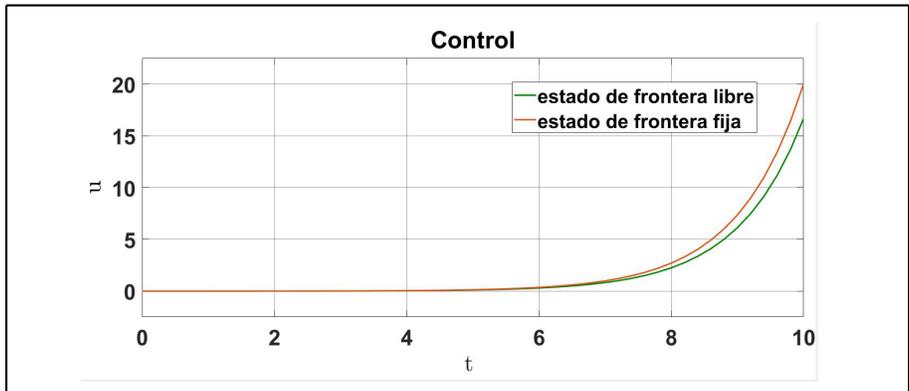


Figura 4.8: Acción de control  $u_*$  (4.20), en función del tiempo  $t \in [0, 10]$ .

## Capítulo 5

# Problema de control óptimo para una molécula diatómica

**Contenido:** Se adaptó la metodología descrita en el Capítulo 4. Específicamente, se encontró la ley de control óptima para el caso de frontera fija y libre

### 5.1. Problema de optimización:

#### Esquema de función de onda

Sea una molécula diatómica de masa reducida,  $m$ , sometida a la acción externa de un campo eléctrico,  $\epsilon(t)$ , siendo su único grado de libertad la distancia interatómica,  $x = q - q_0$ . La dinámica del estado cuántico,  $|\psi(t)\rangle$ , de la molécula obedece a la ecuación de Schrödinger (3.17). El Hamiltoniano total,  $\hat{H}(t)$ , está dado por

(3.4). El potencial total (3.5) está compuesto por el potencial interno de la molécula,  $V_0(x)$ , descrito por el potencial de Morse (3.1); mientras que la interacción externa depende del momento dipolar eléctrico,  $\mu(x)$ , dado por (3.3).

Bajo estas condiciones la ecuación de Schrödinger (3.17) en la representación (base) de la posición,  $x$ , toma la siguiente forma:<sup>1</sup>

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = (H_0 + H_1 u(t)) \psi(x, t), \\ \text{donde: } H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0(x) \text{ y } H_1 = \mu(x). \end{array} \right. \quad (5.1)$$

con  $\psi(x, t) \doteq \langle x | \psi(t) \rangle$  la función de onda de la molécula diatómica, y  $u(t) = -\epsilon(t)$ . Se desea resolver el siguiente problema de optimización.

**Problema 1** *Minimizar la probabilidad de transición de (2.24) entre la función de onda coherente inicial,  $\psi(x, T)$ , y una trayectoria de oscilación deseada,  $\psi_f$ , así como la energía del campo eléctrico aplicado,  $\epsilon(t)$ , en tiempo finito,  $T$ . Esto es, minimizar la funcional*

$$J_0(\psi(x, T), \epsilon(t)) = -s |\langle \psi(x, T) | \psi_f \rangle|^2 + \int_0^T \epsilon^2(t) dt \quad (5.2)$$

*Sujeta a la restricción  $(\psi(x, T), \epsilon(t)) \in \mathfrak{B}_{sch}(\psi_0(x), T)$ . Donde  $s$  es una constante positiva, y  $\mathfrak{B}_{sch}$  es el comportamiento definido para la trayectoria inicial*

---

<sup>1</sup>Cuando se aplica  $\langle x |$  a la ecuación de Schrödinger (3.17) en el lado derecho, se obtiene (recordar (3.4) y ver ecuaciones (3.23) y (3.27)):

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{H} | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{2m} \langle x | \hat{P}^2 | \psi(t) \rangle + \langle x | V(\hat{Q}, t) | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{(-i\hbar)^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x | \psi(t) \rangle + V(x, t) \langle x | \psi(t) \rangle. \end{aligned}$$

$\psi(x, 0) = \psi_0(x) \in \mathcal{L}_2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$  y el tiempo finito,  $T \in \mathbb{R}^+$ :<sup>2</sup>

$$\mathfrak{B}_{sch}(\psi_0(x), T) \doteq \left\{ (\psi(x, t), \epsilon(t)) \in \mathcal{L}_2(\mathbb{R} \times [0, T], \mathbb{C}) \times C_\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R}) \mid \right. \\ \left. \text{dada } \epsilon(t) \in C_\infty([0, T], \mathbb{R}) \exists \text{ una trayectoria suave normalizable, } \right. \\ \left. \psi(x, t) \in \mathcal{L}_2(\mathbb{R} \times [0, T], \mathbb{C}), \psi(x, 0) = \psi_0(x), \text{ soluci3n suave de (5.1)} \right\} \quad (5.3)$$

Se asumirá una trayectoria inicial gaussiana,

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x-m}{\sigma}\right)^2\right) \exp\left(i \langle \widehat{P} \rangle_0 \frac{x}{\hbar}\right) \quad (5.4)$$

El problema 1 es un problema clásico de optimización, cuya soluci3n es obtenida mediante algoritmos iterativos. Estos procedimientos de soluci3n presentan problemas de convergencia debido a que el sistema est1 representado por la ecuaci3n diferencial parcial de variable compleja (5.1). En la literatura se encuentran varios trabajos tratando de asegurar su convergencia y de mejorar su rapidez de convergencia (ver, por ejemplo, [18; 19; 10; 20]).

En el Capitulo 6 del libro de [7], las variables complejas se expresan explícitamente en su parte real y compleja, para obtener un sistema aumentado de variables reales. De esta manera, se pueden aplicar métodos clásicos de optimización de variables reales, y así obtener condiciones necesarias de optimalidad. Pero, su resoluci3n reposa en métodos numéricos que necesitan resolver, en cada iteraci3n, la ecuaci3n diferencial parcial (5.1), de variable compleja,  $\psi(x, t)$ . En la Secci3n 6.6 de [7], en notas y referencias, se hace hincapié sobre la existencia de varias

---

<sup>2</sup>Una funci3n  $f(t)$  es normalizable si  $\int_{-\infty}^{\infty} \|f(t)\|^2 < \infty$ , esto es si  $f(t) \in \mathcal{L}_2$

cuestiones matemáticas sin resolver, concernientes con la convergencia, la rapidez de convergencia, y el conjunto de puntos límites.

## 5.2. Problema de optimización:

### Esquema de valores medios

En esta Sección se reformula el problema de optimización 1, en términos de la representación de estado de valores medios (3.52), de acuerdo al reciente método Bonilla–Bonilla [1]. Como veremos más adelante, este método nos permitirá encontrar una solución explícita de la acción de control,  $u(t)$  y, además, evita problemas de convergencia en la simulación numérica. Para ello, se procede de la siguiente manera:

- (1) Se hace una partición finita,  $0 = T_0 < T_1 < T_2, \dots, T_{N-1} < T_N = T$ , del horizonte de tiempo finito  $[0, T]$ . En cada subintervalo  $[T_{k-1}, T_k]$ ,  $k \in \{1, \dots, N\}$ , se obtiene una descripción de estado lineal invariante en el tiempo.
- (2) El criterio de optimización (5.2) es expresado en términos de los valores medios,  $\langle \hat{X} \rangle$  y  $\langle \hat{P} \rangle$ , en cada uno de los subintervalos  $[T_{k-1}, T_k]$ ,  $k \in \{1, \dots, N\}$ .
- (3) La solución explícita es obtenida con la ayuda de la Tabla 4.1, siguiendo los pasos del ejemplo académico de la Sección 4.2.

El problema de optimización 1, está restringido a las trayectorias (ver (5.3)):

$$(\psi(x, t), \epsilon(t)) \in \mathfrak{B}_{sch}(\psi_0(x), T).$$

Si se asume la trayectoria inicial gaussiana (5.4) y un potencial cuadrático (cf. (3.9)) entonces la trayectoria solución de (5.1) será una función gaussiana desplazándose en el tiempo (ver por ejemplo el Capitulo 2 de [21]); la cual está completamente caracterizada por sus dos primeros momentos estadísticos: su valor medio y su variancia. Esto implica que los comportamientos,  $\mathfrak{B}_{sch}(\psi_0(x), T)$  y  $\mathfrak{B}_{i/s}(\vec{x}_0, T) \cup \mathfrak{B}_\sigma(\vec{x}_{\sigma_0}, T)$ , están mutuamente implicados (ver (5.3), (3.56) y (3.60)). La ventaja que ofrece  $\mathfrak{B}_{i/s}(\vec{x}_0, T) \cup \mathfrak{B}_\sigma(\vec{x}_{\sigma_0}, T)$  es el tratamiento de ecuaciones diferenciales ordinarias; a diferencia de  $\mathfrak{B}_{sch}(\psi_0(x), T)$ , que trabaja con ecuaciones diferenciales parciales. Ahora bien, las representaciones de estado (3.52) y (3.57) son lineales *variantes en el tiempo*. Por lo cual, no se tienen las soluciones clásicas de las matrices exponenciales.

Para simplificar el tratamiento matricial, se realiza la siguiente partición, simétrica de  $N$  puntos, del horizonte de tiempo  $[0, T]$ :

$$\begin{aligned} 0 = T_0 < T_1 < \dots < T_{k-1} < T_k < \dots < T_N = T ; \\ T_k = k\Delta, k \in \{1, \dots, N\}, \Delta = T/N. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Definamos, ahora, los modelos incrementales,  $k \in \{1, \dots, N\}$ ,

$$\frac{d}{d\tau_k} \vec{x}_k(\tau_k) = A_k \vec{x}_k(\tau_k) + Bu(\tau_k), \vec{x}_k(0) = \vec{x}_{k0}, \tau_k \in [0, \Delta], \quad (5.6)$$

$$\frac{d}{d\tau_k} \vec{x}_{\sigma k}(\sigma_k) = A_{\sigma k} \vec{x}_{\sigma k}(\sigma_k), \vec{x}_{\sigma k}(0) = \vec{x}_{\sigma k0}, \tau_k \in [0, \Delta], \quad (5.7)$$

donde  $\tau_k = t - T_{k-1}$ ,  $\vec{x}_{10} = \vec{x}_0$ ,  $\vec{x}_{k0} = \vec{x}_{k-1}(T_{k-1})$ ,  $k \in \{2, \dots, N\}$ ,  $\vec{x}_{\sigma 10} = \vec{x}_{\sigma 0}$ ,  $\vec{x}_{\sigma k0} = \vec{x}_{\sigma k-1}(T_{k-1})$ ,  $k \in \{2, \dots, N\}$  y, además,

$$A_k = A_0 + \bar{u}_k \bar{A}_1, A_{\sigma k} = A_{\sigma 0} + \bar{u}_k \bar{A}_{\sigma 1}, \bar{u}_k = \frac{1}{\Delta} \int_{T_{k-2}}^{T_{k-1}} u(t) dt, \bar{u}_1 = 0. \quad (5.8)$$

Compárese con las representaciones de estado para los promedios (3.52) y las incertidumbres (3.57), con sus respectivas matrices (3.54) y (3.59).

De esta manera, se obtienen los siguientes comportamientos incrementales,  $k \in \{1, \dots, N\}$ ,

$$\begin{aligned} \bar{\mathfrak{B}}_{i/sk}(\vec{x}_{k0}, T_k) &\doteq \left\{ (u, \vec{x}_k) \in C_\infty([T_{k-1}, T_k], \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2) \mid \right. \\ &\quad \text{dada } u(\cdot) \in C_\infty([T_{k-1}, T_k], \mathbb{R}) \exists \text{ una trayectoria suave,} \\ &\quad \left. \vec{x}_k(\cdot) \in C_\infty([T_{k-1}, T_k], \mathbb{R}^2), \vec{x}_k(T_{k-1}) = \vec{x}_{k0}, \text{ solución de (5.6)} \right\}, \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathfrak{B}}_{\sigma k}(\vec{x}_{\sigma k0}, T_k) &\doteq \left\{ (u, \vec{x}_{\sigma k}) \in C_\infty([T_{k-1}, T_k], \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3) \mid \right. \\ &\quad \text{dada } u(\cdot) \in C_\infty([T_{k-1}, T_k], \mathbb{R}) \exists \text{ una trayectoria suave,} \\ &\quad \left. \vec{x}_{\sigma k}(\cdot) \in C_\infty([T_{k-1}, T_k], \mathbb{R}^3), \vec{x}_{\sigma k}(T_{k-1}) = \vec{x}_{\sigma k0}, \text{ solución de (5.7)} \right\}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

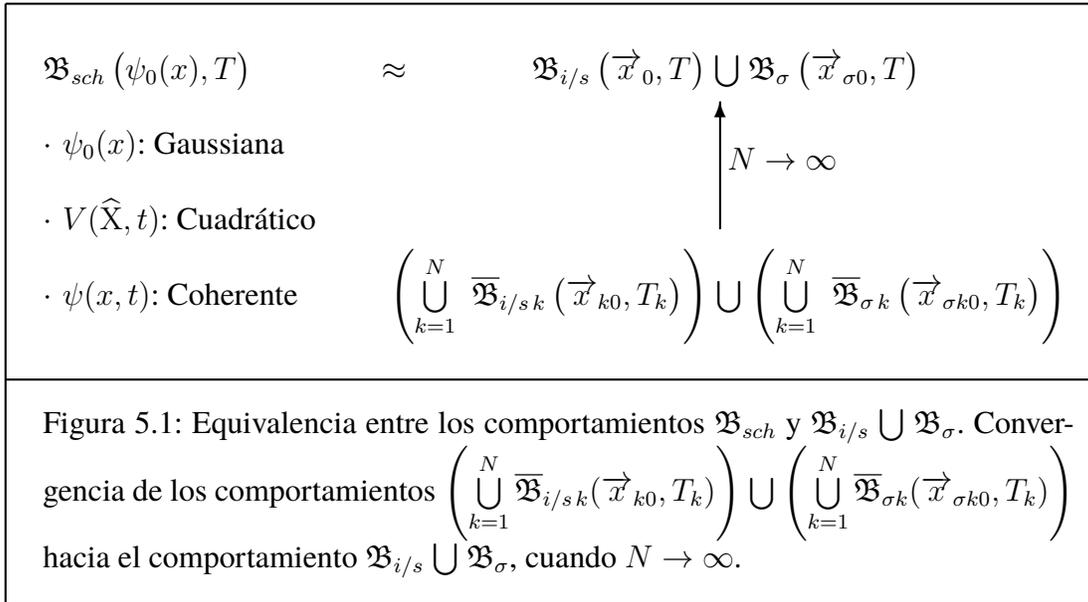
Por continuidad de los comportamientos, se satisface (ver Figura 5.1):

$$\begin{cases} \lim_{N \rightarrow \infty} \bigcup_{k=1}^N \bar{\mathfrak{B}}_{i/sk}(\vec{x}_{k0}, T_k) = \mathfrak{B}_{i/s}(\vec{x}_0, T), \\ \lim_{N \rightarrow \infty} \bigcup_{k=1}^N \bar{\mathfrak{B}}_{\sigma k}(\vec{x}_{\sigma k0}, T_k) = \mathfrak{B}_\sigma(\vec{x}_{\sigma 0}, T). \end{cases} \quad (5.11)$$

Es decir, dados  $\vec{x}(0) = \vec{x}_0 \in \mathbb{R}^2$ ,  $\vec{x}_\sigma(0) = \vec{x}_{\sigma 0} \in \mathbb{R}^3$ ,  $T > 0$ ,  $u(\cdot) \in C_\infty([0, T], \mathbb{R})$ , para un  $\delta > 0 \exists N_\delta \in \mathbb{Z}^+$ :

$$\frac{1}{T} \int_0^T \left( \left\| \vec{x} - \bigcup_{k=1}^{N_\delta} \vec{x}_k \right\| + \left\| \vec{x}_\sigma - \bigcup_{k=1}^{N_\delta} \vec{x}_{\sigma k} \right\| \right) dt < \delta \quad (5.12)$$

donde  $(u, \vec{x}) \in \mathfrak{B}_{i/s}(\vec{x}_0, T)$ ,  $(u, \vec{x}_\sigma) \in \mathfrak{B}_\sigma(\vec{x}_{\sigma 0}, T)$ ,  $(u, \vec{x}_k) \in \overline{\mathfrak{B}}_{i/sk}(\vec{x}_{\sigma k 0}, T_k)$ ,  $k \in \{1, \dots, N_\delta\}$   $(u, \vec{x}) \in \mathfrak{B}_{\sigma, k}$ .



### 5.3. Criterios incrementales

En el problema de optimización, se está minimizando el criterio (5.2) sujeto a la restricción  $(\psi(x, t), \epsilon(t)) \in \mathfrak{B}_{sch}(\psi_0(x), T)$ . En base a la discusión de la Sección anterior, ahora nos vamos a restringir a los intervalos  $[T_{k-1}, T_k]$ ,  $k \in \{1, \dots, N\}$ . Para esto, se tiene que traducir la funcional de costo (5.2) en términos de los

sistemas incrementales (5.6) que definen los comportamientos (5.9), para cada  $k \in \{1, \dots, N\}$ . Por el principio de optimización de Bellman, vamos a considerar los siguientes  $N$  problemas de optimización (ver (5.2), (5.6) y (5.8)).

**Problema 2 .** *Minimizar la funcional*

$$\bar{J}_k(\vec{x}_k(\Delta), u; \Delta) = -s \Phi(\vec{x}_k(\Delta)) + \int_0^\Delta u^2(\tau) d\tau, \quad (5.13)$$

donde  $s \in \mathbb{R}^+$  y (ver (2.28)) :

$$\Phi(\vec{x}_k(\Delta)) = \exp\left(-\frac{mw_k}{2\hbar} (A_{2k}^2 - 2A_{1k}A_{2k} \cos(\phi_{2k} - \phi_{1k}) + A_{1k}^2)\right), \quad (5.14)$$

restringida al comportamiento  $\mathfrak{B}_{i/sk}(\vec{x}_{k0}, T_k)$ , representado por (ver (5.6) y (5.8)):

$$\frac{d}{d\tau_k} \vec{x}_k(\tau_k) = \left(A_0 + \bar{u}_k \bar{A}_1\right) \vec{x}_k(\tau_k) + Bu(\tau_k), \quad \vec{x}_k(0) = \vec{x}_{k0}, \quad (5.15)$$

donde <sup>3</sup>  $\tau_k = t - T_{k-1} \in [0, \Delta]$ .  $\vec{x}_{k0} = \vec{x}_{k-1}(T_{k-1})$ ,  $w_k^2 = \det\left(A_0 + \bar{u}_k \bar{A}_1\right)$ ,  $k \in \{1, \dots, N\}$ .

Dado que se está trabajando con estados coherentes, se tienen (ver (2.12), (3.53) y (3.54)):

---

<sup>3</sup>Recordar que  $\vec{x}_0(T_0) \doteq \vec{x}_0$ .

$$\begin{aligned}
\langle \widehat{X}_k \rangle_2 &= A_{2k} \cos(w_k \tau_k + \phi_{2k}), & \langle \widehat{P}_k \rangle_2 &= -mw_k A_{2k} \sin(w_k \tau_k + \phi_{2k}), \\
\langle \widehat{X}_k \rangle_1 &= A_{1k} \cos(w_k \tau_k + \phi_{1k}), & \langle \widehat{P}_k \rangle_1 &= -mw_k A_{1k} \sin(w_k \tau_k + \phi_{1k}).
\end{aligned} \tag{5.16}$$

Entonces:

$$\begin{cases} A_{2k}^2 = \langle \widehat{X}_2 \rangle_2^2 + \frac{\langle \widehat{P}_2 \rangle_2^2}{(mw_k)^2} = \vec{x}_k^T(\Delta) M_k^2 \vec{x}_k(\Delta), \\ A_{1k}^2 = \langle \widehat{X}_1 \rangle_2^2 + \frac{\langle \widehat{P}_1 \rangle_2^2}{(mw_k)^2} = \vec{x}_{kf}^T(\Delta) M_k^2 \vec{x}_{kf}, \end{cases} \tag{5.17}$$

$$M_k = \begin{bmatrix} 1/(mw_k) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \tag{5.18}$$

donde  $\vec{x}_k(\Delta)$  es la trayectoria solución de (5.15) evaluada en  $\tau_k = \Delta$  y  $\vec{x}_{kf}$  es el estado deseado en  $\tau_k = \Delta$ .

Sustituyendo (5.17) en (5.14), se obtiene:

$$\Phi_\pi(\vec{x}_k(\Delta)) = \exp\left(-\frac{mw_k}{2\hbar} \left(\|M_k \vec{x}_k(\Delta)\| + \|M_k \vec{x}_{kf}\|\right)^2\right), \tag{5.19}$$

por conveniencia se seleccionó la diferencia de fases  $\phi_{2k} - \phi_{1k} = \pi$ .

Notando ahora que:

$$\|M_k \vec{x}_k(\Delta) - M_k \vec{x}_{kf}\| \leq \|M_k \vec{x}_k(\Delta)\| + \|M_k \vec{x}_{kf}\|,$$

$$\|M_k \vec{x}_k(\Delta) - M_k \vec{x}_{kf}\|^2 \leq \left(\|M_k \vec{x}_k(\Delta)\| + \|M_k \vec{x}_{kf}\|\right)^2,$$

$$- \|M_k \vec{x}_k(\Delta) - M_k \vec{x}_{kf}\|^2 \geq - \left( \|M_k \vec{x}_k(\Delta)\| + \|M_k \vec{x}_{kf}\| \right)^2,$$

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\frac{mw_k}{2\hbar} \|M_k \vec{x}_k(\Delta) - M_k \vec{x}_{kf}\|^2\right) \\ & \geq \exp\left(-\frac{mw_k}{2\hbar} \left(\|M_k \vec{x}_k(\Delta) + M_k \vec{x}_{kf}\|\right)^2\right), \end{aligned}$$

$$\tilde{\Phi}(\vec{x}_k(\Delta)) \geq \Phi_\pi(\vec{x}_k(\Delta)). \quad (5.20)$$

Ahora, se propone el siguiente problema de optimización alterno:

**Problema 3 .** *Minimizar la funcional*

$$\tilde{J}_k(\vec{x}_k(\Delta), u; \Delta) = -s\tilde{\Phi}_k(\vec{x}_k(\Delta)) + \int_0^\Delta u^2(\tau_k) d\tau_k, \quad (5.21)$$

donde  $s \in \mathbb{R}^+$  y

$$\tilde{\Phi}_k(\vec{x}_k(\Delta)) = \exp\left(-\frac{mw_k}{2\hbar} (\vec{x}_k(\Delta) - \vec{x}_{kf}) M_k^2 (\vec{x}_k(\Delta) - \vec{x}_{kf})\right), \quad (5.22)$$

restringido al comportamiento  $\mathfrak{B}_{i/s k}(\vec{x}_{k0}, T_k)$  representado por (5.15).

Note que, en el problema 3, se está minimizando la cota superior de la funcional del problema 2, con  $\phi_{2k} - \phi_{1k} = \pi$  (ver (5.22), (5.20) y (5.19)).

## 5.4. Solución incremental

En esta Sección se tratará el problema de optimización 3. Este problema se resuelve siguiendo los pasos del ejemplo académico de la Sección 4.2. Por tal motivo, a continuación detallaremos los pasos en cuestión:

**A. Modelo del sistema.** El modelo del sistema está dado, para cada  $k \in \{1, \dots, N\}$ , por la siguiente representación de estado (ver (5.15), (5.8), (3.54) y (3.55)):

$$\frac{d}{d\tau_k} \vec{x}_k(\tau_k) = A_k \vec{x}_k(\tau_k) + Bu(\tau_k), \quad \vec{x}_k(0) = \vec{x}_{k0}, \quad \tau_k \in [0, \Delta] \quad (5.23)$$

donde

$$\begin{cases} A_k = A_0 + \bar{u}_k \bar{A}_1, & \bar{u}_k = \frac{1}{\Delta} \int_{T_{k-2}}^{T_{k-1}} u(t) dt, \quad \bar{u}_0 = 0, \\ A_0 = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{bmatrix}, & \bar{A}_1 = \begin{bmatrix} 0 & \bar{a}_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, & B = \begin{bmatrix} b_0 \\ 0 \end{bmatrix}. \end{cases} \quad (5.24)$$

El polinomio característico de (5.23)-(5.24) es:

$$\pi_k(s) = \det(s\mathbb{I} - A_k) = s^2 + w_k^2, \quad (5.25)$$

donde

$$w_k^2 = \det A_k = w_0^2 + \bar{u}_k \bar{w}_1^2, \quad w_0^2 = -a_{21}a_{12}, \quad \bar{w}_1^2 = -a_{21}\bar{a}_{12}. \quad (5.26)$$

Note también que

$$\overline{A}_1^2 = 0, \quad \overline{A}_1 B = 0, \quad A_k B = A_0 B. \quad (5.27)$$

De (5.24) y (5.27) se sigue que el par  $(A_k, B)$  es controlable si y solamente si el par  $(A_0, B)$  es controlable. En efecto,

$$\mathcal{C}_{(A_k, B)} \doteq [B \ A_k B] = [B \ A_0 B] \doteq \mathcal{C}_{(A_0, B)}, \quad (5.28)$$

$$\det \mathcal{C}_{(A_0, B)} = \det \begin{bmatrix} b_0 & 0 \\ 0 & b_0 a_{21} \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} b_0 & 0 \\ 0 & b_0/m \end{bmatrix} = \frac{b_0^2}{m} = \frac{(\overline{V}_1)^2}{m} \neq 0. \quad (5.29)$$

Por el teorema de Cayley–Hamilton, se tiene que (ver (5.25)):

$$\exp(A_k \tau_k) = \cos(w_k \tau_k) \mathbb{I} + \frac{1}{w_k} \sin(w_k \tau_k) A_k. \quad (5.30)$$

De (5.30) y (5.28), se sigue que la solución de (5.23) es

$$\vec{x}_k(\tau_k) = \exp(A_k \tau_k) \vec{x}_{k0} + \mathcal{C}_{(A_0, B)} \int_0^{\tau_k} \begin{bmatrix} \cos(w_k(\tau_k - \tau)) \\ \frac{1}{w_k} \sin(w_k(\tau_k - \tau)) \end{bmatrix} u(\tau) d\tau. \quad (5.31)$$

**B. Funcional.** La funcional del criterio a minimizar, está definido, para cada  $k \in \{1, \dots, N\}$ , por (5.21), (5.22) y (5.19).

**C. Función Hamiltoniana.** De (5.21) y (5.23), se obtiene, para cada  $k \in \{1, \dots, N\}$ , la siguiente función Hamiltoniana:

$$H_k(\vec{x}_k, u, \tau_k) = u^2(\tau_k) + \vec{\zeta}_k^T (A_k \vec{x}_k(\tau_k) + Bu(\tau_k)). \quad (5.32)$$

**D. Ecuación de estado.** Aplicando a (5.32) el operador  $\partial/\partial \vec{\zeta}_k$ , se obtiene, para cada  $k \in \{1, \dots, N\}$ , la representación de estado (5.23).

**E. Ecuación de coestado.** Aplicando a (5.32) el operador  $\partial/\partial \vec{x}_k$ , se obtiene, para cada  $k \in \{1, \dots, N\}$ , la siguiente ecuación de coestado:

$$\frac{d}{d\tau_k} \vec{\zeta}_k = -A_k^T \vec{\zeta}_k, \quad \vec{\zeta}_k(\Delta) = \vec{\zeta}_{k\Delta}, \quad \tau_k \in [0, \Delta]. \quad (5.33)$$

De (5.30), se sigue que la solución de (5.33) es

$$\vec{\zeta}_k(\tau_k) = \left( \cos(w_k(\tau_k - \Delta))\mathbb{I} - \frac{1}{w_k} \sin(w_k(\tau_k - \Delta))A_k^T \right) \vec{\zeta}_{k\Delta}. \quad (5.34)$$

**F. Condición estacionaria.** Aplicando a (5.32) el operador  $\partial/\partial u$ , se obtiene para cada  $k \in \{1, \dots, N\}$ , la siguiente ley de control óptima (ver(5.34) y (5.28)):

$$\begin{aligned} u_*(\tau_k) &= -\frac{1}{2}B^T \vec{\zeta}_k(\tau_k) \\ &= -\frac{1}{2} \left[ \cos(w_k(\tau_k - \Delta)) - \frac{1}{w_k} \sin(w_k(\tau_k - \Delta)) \right] \mathcal{C}_{(A_0, B)}^T \vec{\zeta}_{k\Delta}, \end{aligned} \quad (5.35)$$

$$u_*(\tau_k) = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \cos(w_k(\Delta - \tau_k)) & \frac{1}{w_k} \sin(w_k(\Delta - \tau_k)) \end{bmatrix} \mathcal{C}_{(A_0, B)}^T \vec{\zeta}_{k\Delta}. \quad (5.36)$$

Al aplicar la ley de control óptima (5.36) a (5.31), se obtiene, para  $\tau_k = \Delta$ ,

$$\vec{x}_k(\Delta) = \exp(A_k \Delta) \vec{x}_{k0} + \mathcal{C}_{(A_0, B)} \int_0^\Delta \begin{bmatrix} \cos(w_k(\Delta - \tau)) \\ \frac{1}{w_k} \sin(w_k(\Delta - \tau)) \end{bmatrix} u_*(\tau) d\tau, \quad (5.37)$$

$$\vec{x}_k(\Delta) = \exp(A_k \Delta) \vec{x}_{k0} - \frac{1}{2} \mathcal{C}_{(A_0, B)} G_k(\Delta) \mathcal{C}_{(A_0, B)}^T \vec{\zeta}_{k\Delta}. \quad (5.38)$$

Al denotar  $\tau' = \Delta - \tau$ , el Gramiano está dado por

$$G_k(\Delta) = \int_0^\Delta \begin{bmatrix} \cos(w_k \tau') \\ \frac{1}{w_k} \sin(w_k \tau') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(w_k \tau') & \frac{1}{w_k} \sin(w_k \tau') \end{bmatrix} d\tau', \quad (5.39)$$

lo cual se puede reescribir como

$$G_k(\Delta) = \begin{bmatrix} g_{1k}(\Delta) & g_{2k}(\Delta) \\ g_{2k}(\Delta) & g_{3k}(\Delta) \end{bmatrix}, \quad (5.40)$$

donde,

$$\begin{cases} g_{1k}(\Delta) = \frac{\Delta}{2} + \frac{\sin(2w_k\Delta)}{4w_k}, \\ g_{2k}(\Delta) = \frac{1}{2w_k^2} \sin^2(w_k\Delta) = \frac{1}{4w_k^2} (1 - \cos(2w_k\Delta)), \\ g_{3k}(\Delta) = \frac{1}{w_k^2} \left( \frac{\Delta}{2} - \frac{\sin(2w_k\Delta)}{4w_k} \right). \end{cases} \quad (5.41)$$

Calculemos ahora, el determinante del Gramiano.

$$\begin{aligned} \det G_k(\Delta) &= \frac{1}{w_k^2} \left( \left( \frac{\Delta}{2} \right)^2 - \frac{\sin^2(2w_k\Delta)}{(4w_k)^2} \right) - \frac{1}{(4w_k^2)^2} (1 - \cos(2w_k\Delta))^2 \\ &= \left( \frac{\Delta}{2w_k} \right)^2 \left( 1 - \frac{\sin^2(2w_k\Delta) + 1 - 2\cos(2w_k\Delta) + \cos^2(2w_k\Delta)}{(2w_k\Delta)^2} \right) \\ &= \left( \frac{\Delta}{2w_k} \right)^2 \left( 1 - \frac{2(1 - \cos(2w_k\Delta))}{(2w_k\Delta)^2} \right), \\ \det G_k(\Delta) &= \left( \frac{\Delta}{2w_k} \right)^2 \left( 1 - \left( \frac{\sin(w_k\Delta)}{w_k\Delta} \right)^2 \right) > 0 \quad \forall \Delta > 0. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Para completar la definición de la ley de control óptimo (5.36), se necesita determinar el valor de frontera del coestado,  $\vec{\zeta}_{K\Delta}$ .

## 5.5. Caso (1) estado de frontera fija

Para este caso, el valor de frontera del coestado,  $\vec{\zeta}_{k\Delta}$ , se determina al sustituir la ley de control óptimo (5.36) en la solución del sistema (5.31), con  $\tau_k = \Delta$  y  $\vec{x}_k(\Delta) = \vec{x}_{kf}$  (cf. Sección 4.2.2). Entonces de (5.38), se obtiene:

$$\vec{x}_{kf} = \exp(A_k\Delta)\vec{x}_{k0} - \frac{1}{2}\mathcal{C}_{(A_0,B)}G_k(\Delta)\mathcal{C}_{(A_0,B)}^T\vec{\zeta}_{k\Delta}. \quad (5.43)$$

Recordando (5.29) y (5.42), se sigue

$$\vec{\zeta}_{k\Delta} = 2\left(\mathcal{C}_{(A_0,B)}G_k(\Delta)\mathcal{C}_{(A_0,B)}^T\right)^{-1}\left(\exp(A_k\Delta)\vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf}\right). \quad (5.44)$$

De (5.44) y (5.36), se deduce la siguiente ley de control óptimo:

$$\begin{aligned} u_*(\tau_k) &= -\left[\cos(w_k(\Delta - \tau_k)) \frac{1}{w_k} \sin(w_k(\Delta - \tau_k))\right] \\ &\quad \left(\mathcal{C}_{(A_0,B)}G_k(\Delta)\right)^{-1}\left(\exp(A_k\Delta)\vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf}\right), \\ &= -\left(\cos(w_k(\Delta - \tau_k))\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} + \sin(w_k(\Delta - \tau_k))\begin{bmatrix} 1 & 1/w_k \end{bmatrix}\right) \\ &\quad G_K^{-1}(\Delta)\mathcal{C}_{(A_0,B)}^{-1}\left(\exp(A_k\Delta)\vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf}\right), \\ &= -\left(f_{1k}\cos(w_k(\Delta - \tau_k)) + f_{2k}\sin(w_k(\Delta - \tau_k))\right), \\ u_*(\tau_k) &= -f_k\sin(w_k(\Delta - \tau_k) + \theta_{fk}), \quad \tau_k \in [T_{k-1}, T_k], \end{aligned} \quad (5.45)$$

donde,

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{bmatrix} f_{1k} \\ f_{2k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/w_k \end{bmatrix} G_k^{-1}(\Delta) \mathcal{C}_{(A_0, B)}^{-1} (\exp(A_k \Delta) \vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf}), \\ f_k = \sqrt{f_{1k}^2 + f_{2k}^2}, \\ \theta_{fk} = \tan^{-1}(f_{1k}/f_{2k}). \end{array} \right. \quad (5.46)$$

## 5.6. Caso (2) estado de frontera libre

Para este caso, el valor de frontera del coestado,  $\vec{\zeta}_{k\Delta}$ , se obtiene aplicando la condición de frontera, paso (G) de la Tabla 4.1, con  $dT = 0$  (cf. Sección 4.2.3). Es decir (ver (5.21) y (5.22)):

$$0 = \vec{\zeta}_k(\Delta) - \frac{\partial}{\partial \vec{x}_k(\Delta)} \left( -s \tilde{\Phi}_k(\vec{x}_k(\Delta)) \right),$$

$$\vec{\zeta}_k(\Delta) = -s \frac{\partial}{\partial \vec{x}_k(\Delta)} \exp \left( -\frac{mw_k}{2\hbar} (\vec{x}_k(\Delta) - \vec{x}_{kf})^T M_k^2 (\vec{x}_k(\Delta) - \vec{x}_{kf}) \right),$$

$$\vec{\zeta}_k(\Delta) = \frac{mw_k}{\hbar} s M_k^2 (\vec{x}_k(\Delta) - \vec{x}_{kf}) \tilde{\Phi}_k(\vec{x}_k(\Delta)). \quad (5.47)$$

Para resolver (5.47) se asumirá que la partición es suficientemente fina, tal que

$$\tilde{\Phi}_k \approx \tilde{\Phi}_{k-1}, \quad (5.48)$$

con  $\tilde{\Phi}_0 = 1$ . Entonces, de (5.47), (5.48) y (5.38), se deduce:

$$\left(\frac{mw_k}{\hbar}s\tilde{\Phi}_{k-1}\right)^{-1}\vec{\zeta}_{k\Delta} = M_k^2 \left( \exp(A_k\Delta)\vec{x}_{k0} - \frac{1}{2}\mathcal{C}_{(A_0,B)}G_k(\Delta)\mathcal{C}_{(A_0,B)}^T\vec{\zeta}_{(k\Delta)} - \vec{x}_{kf} \right),$$

$$\left(\left(\frac{mw_k}{\hbar}s\tilde{\Phi}_{k-1}\right)^{-1}M_k^{-2} + \frac{1}{2}\mathcal{C}_{(A_0,B)}G_k(\Delta)\mathcal{C}_{(A_0,B)}^T\right)\vec{\zeta}_{k\Delta} = (\exp(A_k\Delta)\vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf}).$$

Puesto que la matriz del lado izquierdo es positiva definida, se tiene entonces la siguiente condición de frontera del coestado

$$\vec{\zeta}_{k\Delta} = 2 \left( \left(\frac{mw_k}{2\hbar}s\tilde{\Phi}_{k-1}\right)^{-1}M_k^{-2} + \mathcal{C}_{(A_0,B)}G_k(\Delta)\mathcal{C}_{(A_0,B)}^T \right)^{-1} (\exp(A_k\Delta)\vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf}). \quad (5.49)$$

Note que cuando  $s \rightarrow \infty$ , (5.49) toma la forma (5.44). Al sustituir (5.49) en (5.36), se deduce la siguiente ley de control óptima:

$$u_*(\tau_k) = - \left[ \cos(w_k(\Delta - \tau_k)) \quad \frac{1}{w_k} \sin(w_k(\Delta - \tau_k)) \right] \mathcal{C}_{(A,B)}^T \left( \left(\frac{mw_k}{2\hbar}s\tilde{\Phi}_{k-1}\right)^{-1}M_k^{-2} + \mathcal{C}_{(A_0,B)}G_k\mathcal{C}_{(A_0,B)}^T \right)^{-1} (\exp(A_k\Delta)\vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf}),$$

$$u_*(\tau_k) = - \left( \cos(w_k(\Delta - \tau_k)) \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \right) + \sin(w_k(\Delta - \tau_k)) \begin{bmatrix} 1 & 1/w_k \end{bmatrix} \left( \bar{s}_k \quad \tilde{\Phi}_{k-1} \right) \mathcal{C}_{(A_0,B)}^T X_k^{-1} (\exp(A_k\Delta)\vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf}), \quad (5.50)$$

donde,

$$\begin{cases} X_k = M_k^{-2} + (\bar{s}_k \tilde{\Phi}_{k-1}) \mathcal{C}_{(A_0, B)} G_K(\Delta) \mathcal{C}_{(A_0, B)}^T \\ \bar{s}_k = \frac{mw_k}{2h} s \end{cases} \quad (5.51)$$

Es decir,

$$u_*(\tau_k) = - (\ell_{1k} \cos(w_k(\Delta - \tau_k)) + \ell_{2k} \sin(w_k(\Delta - \tau_k))),$$

$$u_*(\tau_k) = -\ell_k \sin(w_k(\Delta - \tau_k) + \theta_{\ell k}), \quad \tau_k \in [T_{k-1}, T_k], \quad (5.52)$$

donde,

$$\begin{cases} \begin{bmatrix} \ell_{1k} \\ \ell_{2k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/w_k \end{bmatrix} \mathcal{C}_{(A_0, B)}^T (\bar{s}_k \tilde{\Phi}_{k-1}) X_k^{-1} (\exp(A_0 \Delta) \vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf}), \\ \ell_k = \sqrt{\ell_{1k}^2 + \ell_{2k}^2}, \\ \theta_{\ell k} = \tan^{-1}(\ell_{1k}/\ell_{2k}). \end{cases} \quad (5.53)$$

De (5.53) y (5.51), se deduce que cuando  $s \rightarrow \infty$ , (5.52), toma la forma (5.45), ver (5.46). Sustituyendo (5.49) en (5.38), se tiene que el estado de frontera alcanzado con la ley de control óptimo, (5.52)-(5.53), será (recordar (5.51)):

$$\begin{aligned} \vec{x}_k(\Delta) &= \exp(A_k \Delta) \vec{x}_{k0} - \mathcal{C}_{(A_0, B)} G_k(\Delta) \mathcal{C}_{(A_0, B)}^T \\ &\quad \left( \left( \bar{s}_k \tilde{\Phi}_{k-1} \right)^{-1} M_k^{-2} + \mathcal{C}_{(A_0, B)} G_k(\Delta) \mathcal{C}_{(A_0, B)}^T \right)^{-1} (\exp(A_k \Delta) \vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \vec{x}_k(\Delta) &= \exp(A_k \Delta) \vec{x}_{k0} - \mathcal{C}_{(A_0, B)} G_k(\Delta) \mathcal{C}_{(A_0, B)}^T \\ &\quad \left( \bar{s}_k \tilde{\Phi}_{k-1} \right) X_k^{-1} \left( \exp(A_k \Delta) \vec{x}_{k0} - \vec{x}_{kf} \right), \end{aligned}$$

lo cual toma la siguiente forma,

$$\vec{x}_k(\Delta) = \exp(A_k \Delta) \vec{x}_{k0} - \mathcal{C}_{(A_0, B)} G_k(\Delta) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & w_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell_{1k} \\ \ell_{2k} \end{bmatrix}. \quad (5.54)$$

De (5.54), (5.53) y (5.51), se deduce que cuando  $s \rightarrow \infty$ , entonces

$$\vec{x}_k(\Delta) \rightarrow \vec{x}_{kf}.$$

## 5.7. Resonancia

Los sistemas bajo consideración están dados por las representaciones de estado (ver (5.15), (5.8), (3.54) y (5.28)),

$$\begin{cases} \frac{d}{d\tau_k} \vec{x}_k(\tau_k) = A_k \vec{x}_k(\tau_k) + B u(\tau_k), & \vec{x}_k(0) = \vec{x}_{k0}, \quad \tau_k \in [0, \Delta] \\ y(\tau_k) = C \vec{x}_k(\tau_k) \end{cases} \quad (5.55)$$

donde

$$\left\{ \begin{array}{l} A_k = \begin{bmatrix} 0 & -mw_k^2 \\ 1/m & 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad C = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix}, \\ \bar{u}_k = \frac{1}{\Delta} \int_{T_{k-2}}^{T_{k-1}} u(t) dt, \quad w_k^2 = w_0^2 + \bar{u}_k \bar{w}_1^2 \quad \tau_k \in [0, \Delta], \end{array} \right. \quad (5.56)$$

con condiciones iniciales  $\vec{x}_{10} = \vec{x}_0$ ,  $\vec{x}_{k0} = \vec{x}_{k-1}(T_{k-1})$ ,  $k \in \{2, \dots, N\}$  y un control inicial  $\bar{u}_0 = 0$ .

Las leyes de control óptimo encontradas fueron:

1. Caso estado de frontera fija (ver (5.45)),

$$u_*(\tau_k) = -f_k \sin(w_k(\Delta - \tau_k) + \theta_{fk}). \quad (5.57)$$

2. Caso estado de frontera libre (ver (5.52)),

$$u_*(\tau_k) = -\ell_k \sin(w_k(\Delta - \tau_k) + \theta_{\ell k}). \quad (5.58)$$

Si se iguala el incremento  $\Delta$  de las particiones al periodo de la frecuencia natural de oscilación de la molécula diatómica,

$$\Delta = 2\pi/w_0, \quad (5.59)$$

entonces se tendrá (ver (5.59), (5.57), (5.58) y (5.56)):<sup>4</sup>

---

<sup>4</sup> $\rho_k \in \{f_k, \ell_k\}$  y  $\theta_k \in \{\theta_{fk}, \theta_{\ell k}\}$

$$\bar{u}_k = \frac{1}{\Delta} \int_{T_{k-2}}^{T_{k-1}} u(t) dt = \frac{-1}{\Delta} \rho_k \int_0^{\Delta} \sin\left(\frac{2\pi}{\Delta}(\Delta - t) + \theta_k\right) dt = 0. \quad (5.60)$$

Lo cual implica (ver (5.56), (5.18), (5.22), (5.39), (5.40), (5.57) y (5.58) )

$$\left\{ \begin{array}{l} w_k^2 = w_0^2, \quad M_k = M_0, \quad \tilde{\Phi}_k = \tilde{\Phi}_0, \quad G_k(\Delta) = G_0(\Delta) \\ A_k = A_0 = \begin{bmatrix} 0 & -mw_0^2 \\ 1/m & 0 \end{bmatrix}, \\ u_*(\tau_k) = -\rho_k \sin(w_0(\Delta - \tau_k) + \theta_k), \quad \rho_k \geq 0 \end{array} \right. \quad (5.61)$$

Note que para el caso del estado de frontera fija  $(\rho_k, \theta_k) = (f_k, \theta_{fk})$ ; mientras que para el caso del estado de frontera libre  $(\rho_k, \theta_k) = (\ell_k, \theta_{\ell k})$ .

Esto significa que la ley de control óptima proporciona acciones de control que están en resonancia con el sistema. En efecto, de la representación de estado (5.55), se sigue la siguiente función de transferencia (ver también la Figura 5.2):

$$[h]F_0(s) = C(s\mathbb{I} - A_0)^{-1}B = \frac{b_0/m}{s^2 + w_0^2}. \quad (5.62)$$

Del diagrama de Bode, ver Figura 5.2, se infiere trivialmente que cuando se excita el sistema con una senoide sintonizada con la frecuencia de resonancia, el estado permanente de la salida tiende a infinito.

Aquí es interesante vislumbrar la manera en qué la salida tiende a infinito. La matriz exponencial de (5.55) y (5.56) (con  $w_k = w_0$ ) toma la siguiente forma:

$$\exp(A_0 t) = \cos(w_0 t)\mathbb{I} + \frac{1}{w_0} \sin(w_0 t)A_0, \quad (5.63)$$

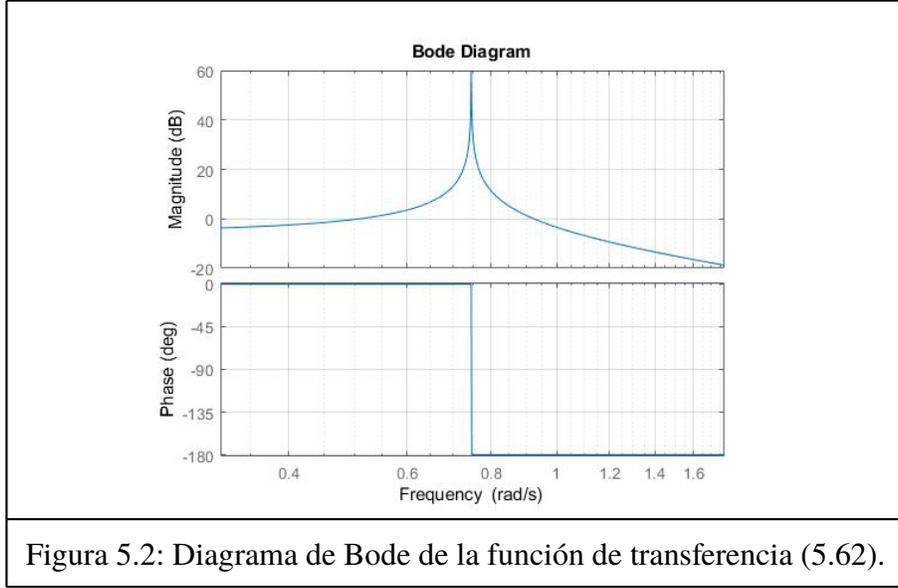


Figura 5.2: Diagrama de Bode de la función de transferencia (5.62).

por lo que, para  $t = N\Delta$ , con  $N \in \mathbb{N}$ , se tiene (ver (5.55), (5.56), (5.59), (5.63) y (5.61)):

$$\vec{x}(N\Delta) = \exp(A_0 N\Delta) \vec{x}_0 + \int_0^{N\Delta} \exp A_0(N\Delta - \tau) B u^*(\tau) d\tau$$

$$\vec{x}(N\Delta) = \vec{x}_0 + \int_0^{(2N)\pi/w_0} \left( \cos(w_0(N\Delta - \tau)) B + \frac{1}{w_0} \sin(w_0(N\Delta - \tau)) A_0 B \right) u^*(\tau) d\tau$$

$$\vec{x}(N\Delta) \vec{x}_0 - \mathcal{C}_{(A_0, B)} \sum_{k=1}^N \rho_k \int_{2(k-1)\pi/w_0}^{2k\pi/w_0} \begin{bmatrix} \cos(w_0(N\Delta - \tau)) \\ (1/w_0) \sin(w_0(N\Delta - \tau)) \end{bmatrix} \sin(w_0(\Delta - \tau) + \theta_k) d\tau$$

$$\begin{aligned} \vec{x}(N\Delta) &= \vec{x}_0 - \mathcal{C}_{(A_0, B)} \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} \rho_k \\ &\int_{2(k-1)\pi/w_0}^{2k\pi/w_0} \left[ \begin{array}{c} \sin(w_0(1-N)\Delta + \theta_k) - \sin(2w_0\tau - w_0(1+N)\Delta - \theta_k) \\ \pi/w_0(\cos(w_0(1-N)\Delta + \theta_k) - \cos(2w_0\tau - w_0(1+N)\Delta - \theta_k)) \end{array} \right] d\tau \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \vec{x}(N\Delta) &= \vec{x}_0 - \mathcal{C}_{(A_0, B)} \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} \rho_k \\ &\left[ \begin{array}{c} \tau \sin(w_0(1-N)\Delta + \theta_k) + \frac{1}{2w_0} \cos(2w_0\tau - w_0(1+N)\Delta - \theta_k) \\ \frac{1}{w_0} (\tau \cos(w_0(1-N)\Delta + \theta_k) - \frac{1}{2w_0} \sin(2w_0\tau - w_0(1+N)\Delta - \theta_k)) \end{array} \right] \Bigg|_{2(k-1)\pi/w_0}^{2k\pi/w_0} \end{aligned}$$

Por lo cual, el estado  $\vec{x}$  y la salida  $y$  están dadas por

$$\begin{aligned} \vec{x}(N\Delta) &= \vec{x}_0 - \mathcal{C}_{(A_0, B)} \sum_{k=1}^N (\pi/w_0^2) \rho_k \begin{bmatrix} w_0 \sin(w_0(1-N)\Delta + \theta_k) \\ \cos(w_0(1-N)\Delta + \theta_k) \end{bmatrix} \\ y(N\Delta) &= C \vec{x}_0 - C \mathcal{C}_{(A_0, B)} \sum_{k=1}^N (\pi/w_0^2) \rho_k \begin{bmatrix} w_0 \sin(w_0(1-N)\Delta + \theta_k) \\ \cos(w_0(1-N)\Delta + \theta_k) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5.64)$$

Tomando en cuenta (5.56), (5.61) y (5.59), podemos expresar la salida de la siguiente manera:

$$y(N\Delta) = C \vec{x}_0 - \frac{\Delta b_0}{2m} \sum_{k=1}^N \cos(\theta_k) \rho_k. \quad (5.65)$$

**Observación 1** Si existe  $\epsilon > 0$  tal que  $1 \geq -\cos(\theta_k) \geq 1 - \epsilon > 0 \forall k \in \{1, \dots, N\}$  y  $\rho_k > 0$  casi en todas partes, entonces

$$\lim_{N \rightarrow \infty} y(N\Delta) \rightarrow \infty. \quad (5.66)$$

**Observación 2** Bajo las mismas condiciones de la Observación 1, sea  $\rho_0 > 0$  tal que:

$$\sum_{k=1}^N \rho_k = N\rho_0, \quad (5.67)$$

entonces

$$0 < \rho_0 \leq \frac{1}{N} \left( \frac{2m}{(1-\epsilon)\Delta b_0} \right) (y(N\Delta) - C\vec{x}_0). \quad (5.68)$$

Esto implica que el promedio de la acción de control,  $\rho_0$ , se puede hacer tan pequeño como se desee, mediante la modulación del número de intervalos,  $N$ , de la partición del intervalo de control  $[0, T]$ , sintonizadas con la frecuencia de resonancia  $w_0$ ,  $\Delta \doteq 2\pi/w_0$ .

# Capítulo 6

## Simulaciones

### Contenido: Se presentan simulaciones

En este Capítulo se muestran los resultados de aplicar la teoría de control óptimo al método Bonilla–Bonilla [1] para la molécula diatómica descrita en el Capítulo 3, en los casos de estado de frontera fija (5.45)-(5.46) y estado de frontera libre (5.52)-(5.53).

### 6.1. Sistema

El sistema involucrado en esta simulación, corresponde a la molécula diatómica descrita en el Capítulo 3. Para poder simular la dinámica de la distancia intermolecular y su momento asociado, así como sus incertidumbres, necesitamos manejar un escalamiento apropiado para las unidades involucradas. En la Tabla 6.1, se muestran los escalamientos empleados en la simulación.

Magnitud física	Factor de escala	Valor	Unidad
masa	$k_m$	$1,6600 \times 10^{-27}$	$kg/amu$
longitud	$k_x$	$5,2910 \times 10^{-11}$	$m/a_0$
tiempo	$k_t$	$1 \times 10^{-15}$	$s/fs$
energía	$k_e$	$4,3590 \times 10^{-18}$	$J/E_H$
momento	$k_p = k_m k_x / k_t$	$8,7831 \times 10^{-23}$	$(kg \cdot m/s)/(amu \cdot a_0/fs)$
constante de Planck	$h$	$1,0540 \times 10^{-34}$	$J \cdot s$
$\hbar = h/2\pi$	$\hbar_e = h(k_t/(k_m k_x^2))$	0.0227	$amu \cdot a_0^2 \cdot fs^{-1}$
$\Delta$	$2\pi/w_0$	8.4128	$fs$

Tabla 6.1: Constantes y factores de escala empleados en la simulación.

Nótese que, para el escalamiento en la simulación, se emplearon unidades atómicas, como  $amu$ ,  $a_0$ ,  $E_H$ ,  $fs$ . En primer lugar, el  $amu$  (de las siglas en inglés “atomic mass unit”) es una constante física que se utiliza para expresar masas atómicas y masas moleculares, se define como la doceava parte de la masa de un átomo libre de carbono–12. En segundo lugar, la unidad  $a_0$  es el radio de Bohr; por definición, corresponde al radio promedio mas pequeño del átomo de hidrógeno con energía bien definida. En tercer lugar, la unidad  $E_H$ , llamada energía de Hartree, es aproximadamente el doble de la energía de ionización del estado base del átomo de hidrógeno. Finalmente, los tiempos característicos de los procesos atómicos son del orden de femtosegundos, denotados por  $fs$ .

En cuanto a los parámetros que caracterizan al sistema, se presentan a continuación, en la Tabla 6.2.

Nombre	Variable	Valor	Unidades
Profundidad del potencial de Morse	$D_0$	$0,1994k_e$	$J$
Ancho del potencial de Morse	$\beta$	$1,189/k_x$	$m^{-1}$
Constante del momento dipolar eléctrico	$\mu_0$	$3,088k_e$	$J$
Masa del Oxígeno	$m_O$	15,999	$amu$
Masa del Hidrógeno	$m_H$	1,0078	$amu$
Masa reducida	$m$	0,9481	$amu$
Frecuencia natural escalada	$w_0 = \beta \sqrt{\frac{2D_0}{(m k_m)}} k_t$	$7,4686 \times 10^{14}$	$rad \cdot s^{-1}$
Posición del máximo valor del momento dipolar eléctrico	$q_*$	0,6	$a_0$
Distancia intermolecular inicial	$q_0$	1.821	$a_0$
	$q_{km}$	$q_* k_x$	$3,1746 \times 10^{-11}$
Coficiente lineal del potencial externo (ver ecuación (3.13))	$\bar{V}_1 = \mu_0 \left( \frac{q_0}{q_*} - 1 \right) \exp \left( -\frac{q_0}{q_*} \right)$	$1,3169 \times 10^{-18}$	$J$
Coficiente cuadrático del potencial externo (ver ecuación (3.16))	$\bar{V}_2 = \left( \frac{\mu_0}{q_* k_q} \right) \left( \frac{q_0}{q_*} - 2 \right) \exp \left( -\frac{q_0}{q_*} \right)$	$2,1098 \times 10^{-08}$	$J \cdot m^{-1}$
$a_{12}$ (ver (3.54) y (3.55))	$-(m k_m) w_0^2 (k_t k_x / k_p)$	-0,5288	$amu \cdot fs^{-2}$
$\bar{a}_{12}$ (ver (3.54) y (3.55))	$-\bar{V}_2 (k_t / k_p)$	-0,2402	$a_0^2 \cdot amu \cdot fs^{-2}$
$a_{21}$ (ver (3.54) y (3.55))	$\left( \frac{1}{m k_m} \right) \left( \frac{k_t k_p}{k_x} \right)$	1,0548	$amu^{-1}$
$b_0$ (ver (3.54) y (3.55))	$\bar{V}_1 \left( \frac{k_t}{k_p k_x} \right)$	0,2834	$a_0^2 \cdot amu \cdot fs^{-2}$
$\bar{w}_1^2$ (ver (3.54) y (3.55))	$-a_{21} \bar{a}_{12}$	0,2534	$a_0 \cdot rad^2 \cdot fs^{-2}$

Tabla 6.2: Parámetros del sistema diatómico.

Tomando en cuenta los factores de escala y constantes físicas de las respectivas Tablas 6.1 y 6.2, se puede escribir la representación de estado de los promedios (3.52) con sus respectivas matrices (3.54). De igual manera, se puede escribir la

representación de estado de las incertidumbres (3.57) con sus respectivas matrices (3.59). Las matrices involucradas (incluyendo la matriz de controlabilidad  $\mathcal{C}_{(A_k, B)}$ ) toman entonces la siguiente forma numérica:

$$\begin{aligned}
 A_0 &= \begin{bmatrix} 0 & -0,5288 \\ 1,0548 & 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{A}_1 = \begin{bmatrix} 0 & -0,2834 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad B_0 = \begin{bmatrix} 0,2834 \\ 0 \end{bmatrix}, \\
 A_{\sigma_0} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1,0577 \\ 0 & 0 & 2,1095 \\ 1,0548 & -0,5288 & 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{A}_{\sigma_1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -0,4804 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0,2402 & 0 \end{bmatrix}, \\
 \mathcal{C}_{(A_k, B)} &\doteq [B \ A_k B] = \begin{bmatrix} 0,2834 & 0 \\ 0 & 0,2989 \end{bmatrix}.
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

En este Capítulo, simularemos llevar a la molécula de la condición inicial,  $q_0 = 1,821 [a_0]$  a la condición final  $q_1 = 1,9108 [a_0]$ , como se indica a continuación:

$$\begin{aligned}
 x_0 &= q_0 - q_0 = 0 [a_0] \\
 x_1 &= q_1 - q_0 = 0,1698 [a_0]
 \end{aligned} \tag{6.2}$$

Tome en cuenta que estamos empleando la aproximación armónica para el potencial molecular (ver Figura 6.1), así como el momento dipolar eléctrico (ver Figura 6.2).

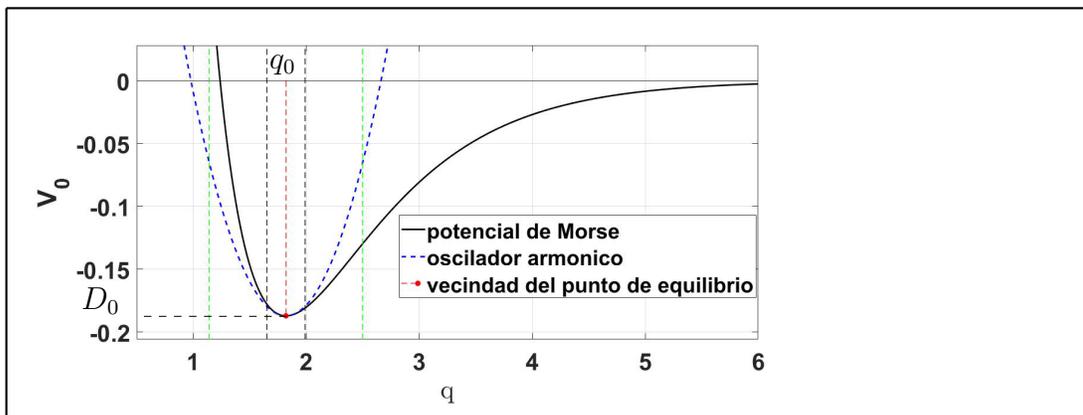


Figura 6.1: Potencial molecular de Morse (línea negra) aproximado por un oscilador armónico (línea punteada azul), alrededor del punto de equilibrio (punto rojo). La región de validez de la aproximación armónica se indica mediante líneas punteadas grises. Para la región, por ejemplo, indicada por las líneas punteadas verdes, el oscilador armónico deja de ser una buena aproximación.

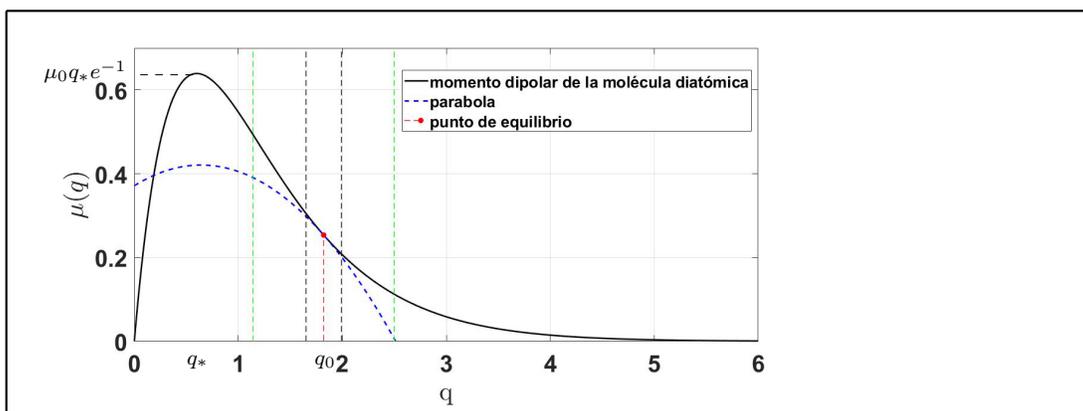


Figura 6.2: Momento dipolar eléctrico de la molécula (línea negra), aproximado por un oscilador armónico (línea punteada azul), alrededor del punto de equilibrio (punto rojo) de la molécula. La región de validez de la aproximación armónica se indica mediante líneas punteadas grises. Para la región, por ejemplo, indicada por las líneas punteadas verdes, el oscilador armónico deja de ser una buena aproximación.

Las condiciones iniciales de las incertidumbres se seleccionan para satisfacer el mínimo de la desigualdad de Heisenberg:

$$\sigma_{X0}^2 = 0,015625[a_0^2], \quad \sigma_{P0}^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 / \sigma_{X0}^2. \quad (6.3)$$

Se van a considerar las siguientes tres particiones para el horizonte de tiempo finito (ver el principio de la Sección 5.2):

$$N_1 = 1, \quad N_2 = 10, \quad N_3 = 100, \quad (6.4)$$

siendo la duración de cada partición (cf. (5.59)),

$$\Delta = 2\pi/w_0 = 8,4128 [fs]. \quad (6.5)$$

De esta manera, se tienen los siguientes horizontes finitos,

$$T_1 = N_1\Delta = 8,4128 [fs], \quad T_2 = N_2\Delta = 84,128 [fs], \quad T_3 = N_3\Delta = 841,28 [fs]. \quad (6.6)$$

En cuanto a las referencias a seguir, están dadas por ( $\ell \in \{1, 2, 3\}$ ):

$$\begin{cases} r_X(k) = x_0 + \frac{x_1}{2} \left(1 - \cos(k\pi/N_\ell)\right), \quad k \in \{1, \dots, N_\ell\} \\ r_P(k) = \frac{m\pi x_1}{2N_\ell\Delta} \sin(k\pi/N_\ell), \quad k \in \{1, \dots, N_\ell\} \end{cases} \quad (6.7)$$

En las Figuras 6.3 (a), (c), (e) se muestran las diferentes particiones para la referencia  $r_X$ . En cuanto a las Figuras 6.3 (b), (d), (f) se muestran las diferentes particiones

para la referencia  $r_P$ .

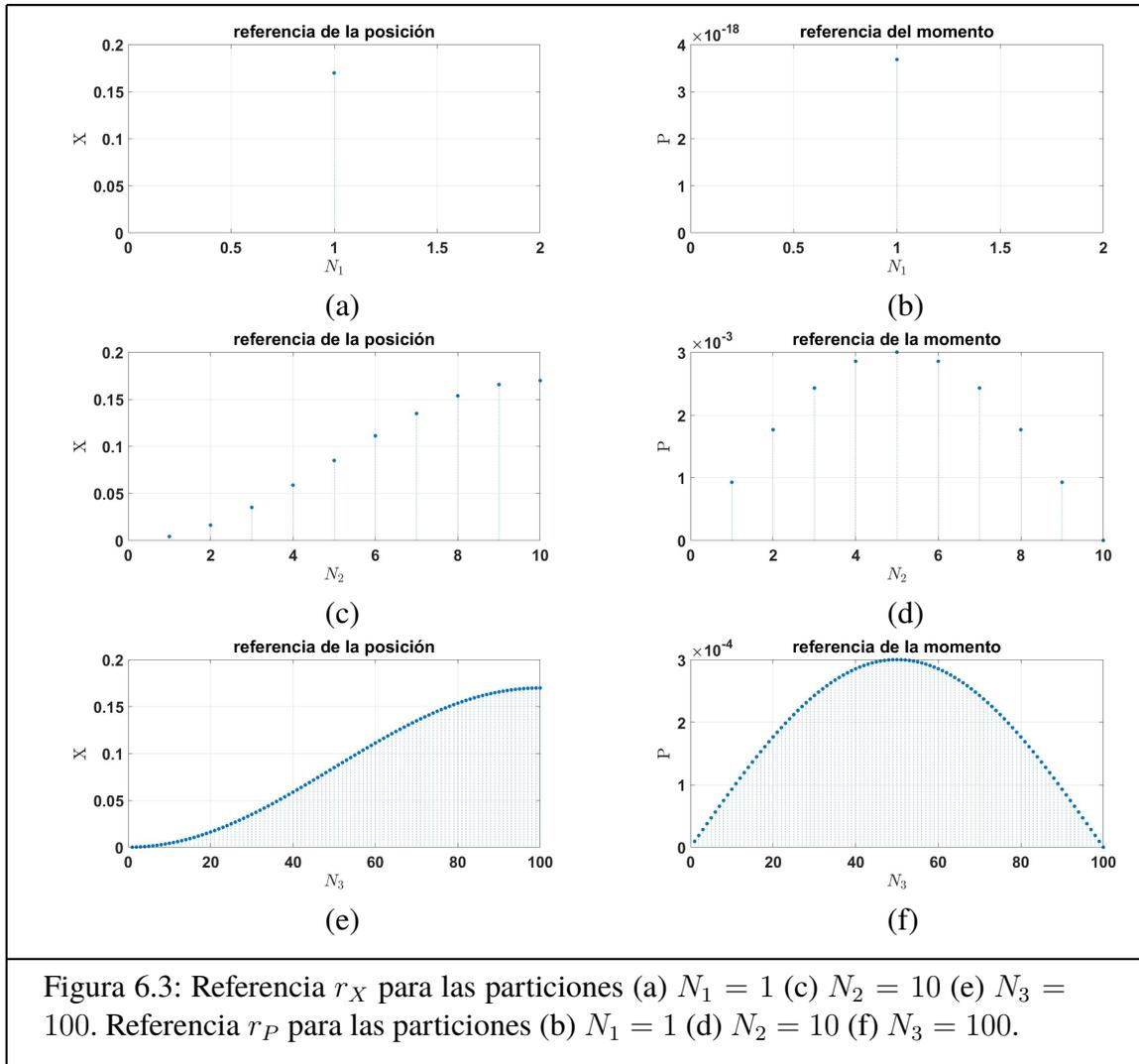


Figura 6.3: Referencia  $r_X$  para las particiones (a)  $N_1 = 1$  (c)  $N_2 = 10$  (e)  $N_3 = 100$ . Referencia  $r_P$  para las particiones (b)  $N_1 = 1$  (d)  $N_2 = 10$  (f)  $N_3 = 100$ .

### 6.1.1. Cálculo de la ley de control óptimo para el caso (1) estado de frontera fija

La ley de control se calcula de manera recursiva, como se muestra a continuación:

**Paso 1.** Se inicializan las variables como sigue (ver Tabla (6.2))

$$\begin{aligned} \bar{u}_0 = 0, \quad w_0 = 7,4686 \times 10^{14}, \quad \bar{u}_1 = 0, \quad \bar{w}_1 = 0,7469, \quad x_1 = 0, \quad p_1 = 0, \\ A_0 = \begin{bmatrix} 0 & -0,5288 \\ 1,0548 & 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{A}_1 = \begin{bmatrix} 0 & -0,2402 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \Delta = 8,4128, \\ \vec{x}_{10} = 0,1698 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{u}_1 = 0, \quad \vec{x}_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{w}_1^2 = 0,2534, \\ \mathcal{C}_{(A_k, B)} \doteq [B \ A_k B] = \begin{bmatrix} 0,2834 & 0 \\ 0 & 0,2989 \end{bmatrix}, \quad k = 0. \end{aligned}$$

**Paso 2.** Se realizan los cálculos siguientes, donde  $k = k + 1$ .

Calculando la frecuencia (ver (5.26) y (5.52))

$$w_k = \sqrt{w_0^2 + \bar{u}_k \bar{w}_1^2},$$

siendo el sistema

$$A_k = A_0 + \bar{u}_k \bar{A}_1.$$

De esta manera, la matriz exponencial es (ver (5.27) y (5.30)):

$$\exp(A_k \Delta) = \cos(w_k \Delta) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \left( \frac{1}{w_k} \right) \sin(w_k \Delta) A_k,$$

donde las componentes del Gramiano (5.40) son,

$$G_k(\Delta) = 2w_k \begin{bmatrix} \bar{g}_{1k} & \bar{g}_{2k} \\ \bar{g}_{2k} & \bar{g}_{3k} \end{bmatrix}.$$

Cabe mencionar que las componentes del Gramiano se calculan de la siguiente manera (ver (5.41)),

$$\bar{g}_{1k} = w_k \Delta + \frac{\sin(2w_k \Delta)}{2},$$

$$\bar{g}_{2k} = \frac{(\sin(w_k \Delta))^2}{w_k},$$

$$g_{3k} = \frac{(\Delta - \frac{\sin(2w_k \Delta)}{2w_k})}{w_k}.$$

Además, el estado de frontera (ver (6.7)) es:

$$\vec{x}_{fk} = \begin{bmatrix} r_P(k) \\ r_X(k) \end{bmatrix}.$$

Los parámetros de la ley de control (5.45) son los siguientes (ver (5.46) y recordar (5.42)),

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{bmatrix} f_{1k} \\ f_{2k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/w_k \end{bmatrix} G_k^{-1}(\Delta) \mathcal{C}_{(A_0, B)}^{-1} (\exp(A_k \Delta) \vec{x}_{k0} - \vec{x}_{fk}), \\ f_k = \sqrt{f_{1k}^2 + f_{2k}^2}, \\ \theta_{fk} = \tan^{-1}(f_{1k}/f_{2k}). \end{array} \right.$$

**Paso 3.** Actualización de variables (ver (5.51), (5.45) y (5.8)):

$$u(t) = f_1 \cos(w(\Delta - t)) - f_2 \sin(w(\Delta - t)),$$

$$\bar{u}_{k+1} = \frac{1}{\Delta} \int_0^{\Delta} u(t) dt,$$

$$\bar{u}_{k+1} = - \left( \frac{1}{w_k \Delta} \right) (f_{1k} \sin(w_k \Delta) + f_{2k} (1 - \cos(w_k \Delta))),$$

$$\vec{x}_{(k+1)0} = \vec{x}_{kf}.$$

**Paso 4.** Si  $k < N_\ell$ , ir al paso 2.

**Paso 5.** Fin del algoritmo.

A continuación se muestran los resultados obtenidos para las diferentes particiones,  $N_1 = 1$ ,  $N_2 = 10$  y  $N_3 = 100$ , ver respectivamente Figuras 6.4, 6.5, 6.6.

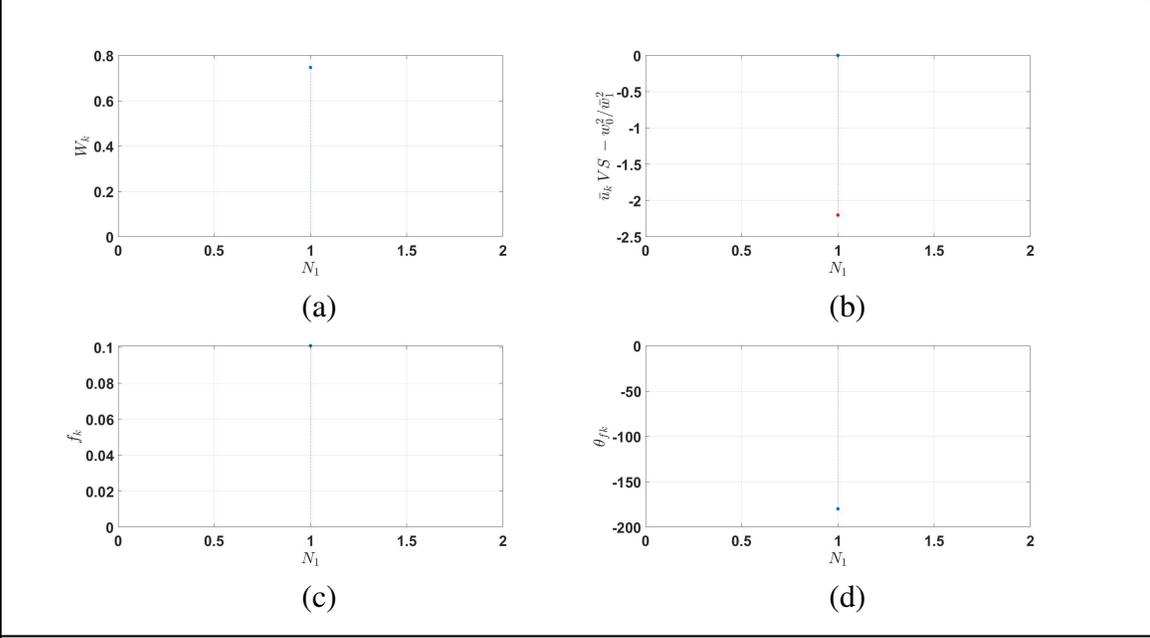


Figura 6.4: Parámetros para el diseño del control, para  $N_1 = 1$ , (a)  $w_k$  (b)  $\bar{u}_k$  vs.  $-w_0^2/\bar{w}_1^2$  (c)  $f_k$  (d)  $\theta_{fk}$ .

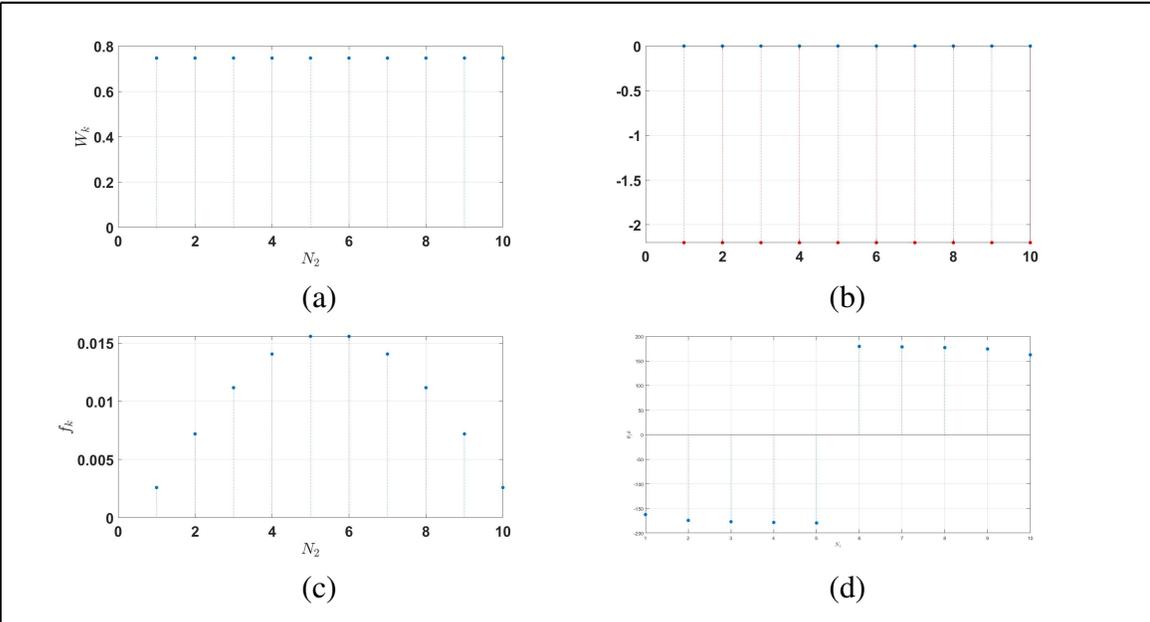
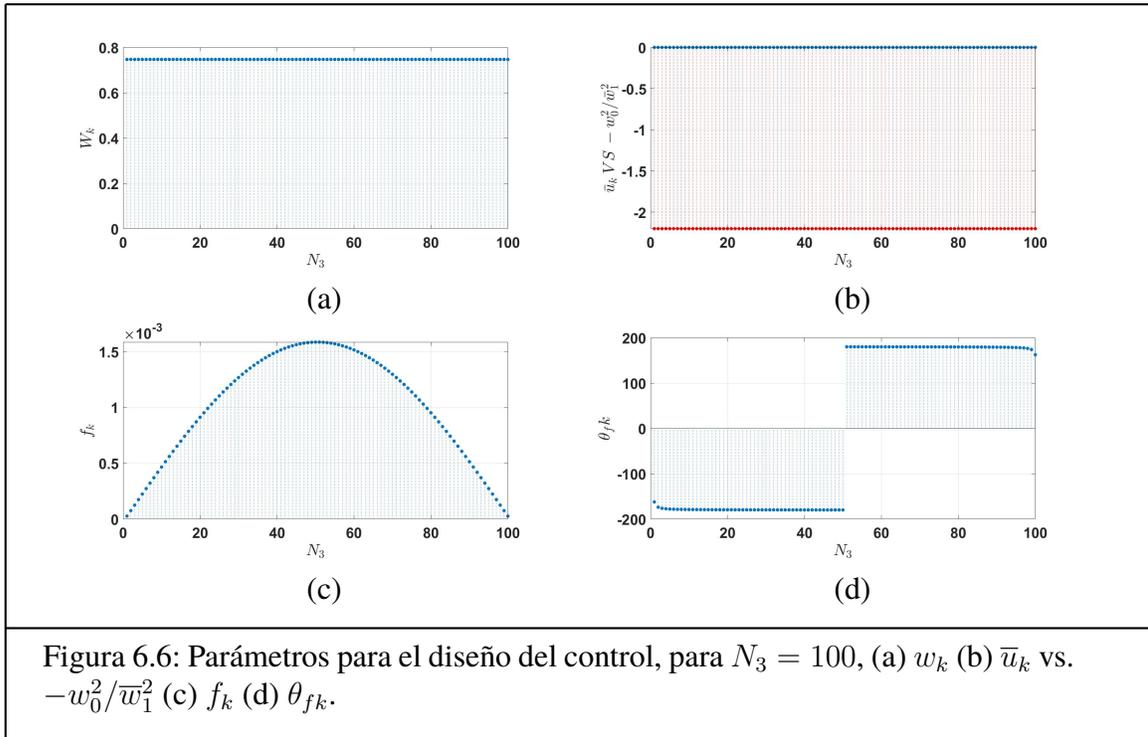


Figura 6.5: Parámetros para el diseño del control, para  $N_2 = 10$ , (a)  $w_k$  (b)  $\bar{u}_k$  vs.  $-w_0^2/\bar{w}_1^2$  (c)  $f_k$  (d)  $\theta_{fk}$ .



De las figuras 6.4 (c), 6.5 (c) y 6.6 (c) se nota que para  $N = 1$ ,  $N = 10$  y  $N = 100$ , respectivamente, la máxima amplitud de la ley de control es  $f_k = 0,1$ ,  $f_k = 0,015$  y  $f_k = 0,0015$ . Esto concuerda con la discusión de la Sección 5.7.

### 6.1.2. Cálculo de la ley de control óptimo para el caso (2) estado libre

La ley de control se calcula de manera recursiva, como se muestra a continuación:

**Paso 1** Se inicializan las variables como sigue (ver Tabla (6.2))

$$\bar{u}_0 = 0, \quad w_0 = 7,4686 \times 10^{14}, \quad \bar{u}_1 = 0, \quad \bar{w}_1 = 0,7469, \quad x_1 = 0, \quad p_1 = 0,$$

$$\begin{aligned}
A_0 &= \begin{bmatrix} 0 & -0,5288 \\ 1,0548 & 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{A}_1 = \begin{bmatrix} 0 & -0,2402 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \Delta = 8,4128, \\
\vec{x}_{10} &= 0,1698 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{u}_1 = 0, \quad \vec{x}_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{w}_1^2 = 0,2534, \\
\mathcal{C}_{(A_k, B)} &\doteq [B \ A_k B] = \begin{bmatrix} 0,2834 & 0 \\ 0 & 0,2989 \end{bmatrix}, \quad k = 0, \quad \bar{s}_k = 1, \quad k \in \{1, \dots, N_\ell\}, \\
\tilde{\Phi}_0 &= 1.
\end{aligned}$$

De igual manera, inicializamos las siguientes variables,

$$\tilde{\Phi}_k(\vec{x}_k(\Delta)) = \exp\left(-\frac{mw_k}{2\hbar}(\vec{x}_k(\Delta) - \vec{x}_{kf})M_k^2(\vec{x}_k(\Delta) - \vec{x}_{kf})\right),$$

$$\tilde{\Phi}_k \approx \tilde{\Phi}_{k-1},$$

$$\left\{ \begin{array}{l} X_k = M_k^{-2} + (\bar{s}_k \tilde{\Phi}_{k-1})\mathcal{C}_{(A_0, B)}G_K(\Delta)\mathcal{C}_{(A_0, B)}^T \\ \bar{s}_k = \frac{mw_k}{2\hbar}S \end{array} \right.$$

**Paso 2.** Se realizan los cálculos siguientes, donde  $k = k + 1$ .

Calculando la frecuencia (ver (5.26) y (5.52))

$$w_k = \sqrt{w_0^2 + \bar{u}_k \bar{w}_1^2},$$

siendo el sistema

$$A_k = A_0 + \bar{u}_k \bar{A}_1.$$

De esta manera, la matriz exponencial está numéricamente dada por (ver (5.27) y (5.30)):

$$\exp(A_k \Delta) = \cos(w_k \Delta) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \left( \frac{1}{w_k} \right) \sin(w_k \Delta) A_k,$$

donde las componentes del Gramiano (5.40),

$$G_k(\Delta) = 2w_k \begin{bmatrix} \bar{g}_{1k} & \bar{g}_{2k} \\ \bar{g}_{2k} & \bar{g}_{3k} \end{bmatrix}$$

Cabe mencionar que las componentes del Gramiano se calculan de la siguiente manera (ver (5.41)),

$$\bar{g}_{1k} = w_k \Delta + \frac{\sin(2w_k \Delta)}{2},$$

$$\bar{g}_{2k} = \frac{(\sin(w_k \Delta))^2}{w_k},$$

$$g_{3k} = \frac{(\Delta - \frac{\sin(2w_k \Delta)}{2w_k})}{w_k}.$$

Además, el estado final (ver (6.7)) es:

$$\vec{x}_{\ell k} = \begin{bmatrix} r_P(k) \\ r_X(k) \end{bmatrix}.$$

Los parámetros de la ley de control (5.53) son (ver (5.51) y (5.18)),

$$M_k = \begin{bmatrix} 1/(mw_k) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$X_k = M_k^{-2} + (\bar{s}_k \tilde{\Phi}_{k-1}) \mathcal{C}_{(A_0, B)} G_K(\Delta) \mathcal{C}_{(A_0, B)}^T,$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{bmatrix} \ell_{1k} \\ \ell_{2k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/w_k \end{bmatrix} \mathcal{C}_{(A_0, B)}^T (\bar{s}_k \tilde{\Phi}_{k-1}) X_k^{-1} (\exp(A_0 \Delta) \vec{x}_{k0} - \vec{x}_{\ell k}), \\ \ell_k = \sqrt{\ell_{1k}^2 + \ell_{2k}^2}, \\ \theta_{\ell k} = \tan^{-1}(\ell_{1k}/\ell_{2k}). \end{array} \right.$$

**Paso 3.** Actualización de variables (ver (5.51), (5.45) y (5.8)):

$$u(t) = \ell_1 \cos(w(\Delta - T)) - \ell_2 \sin(w(\Delta - T)),$$

$$\bar{u}_{k+1} = \frac{1}{\Delta} \int_0^\Delta u(t) dt,$$

$$\bar{u}_{k+1} = - \left( \frac{1}{w_k \Delta} \right) (\ell_{1k} \sin(w_k \Delta) + \ell_{2k} (1 - \cos(w_k \Delta))),$$

$$\vec{x}_{(k+1)0} = \exp(A_k \Delta) \vec{x}_{k0} - \mathcal{C}_{(A_0, B)} G_k(\Delta) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & w_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell_{1k} \\ \ell_{2k} \end{bmatrix},$$

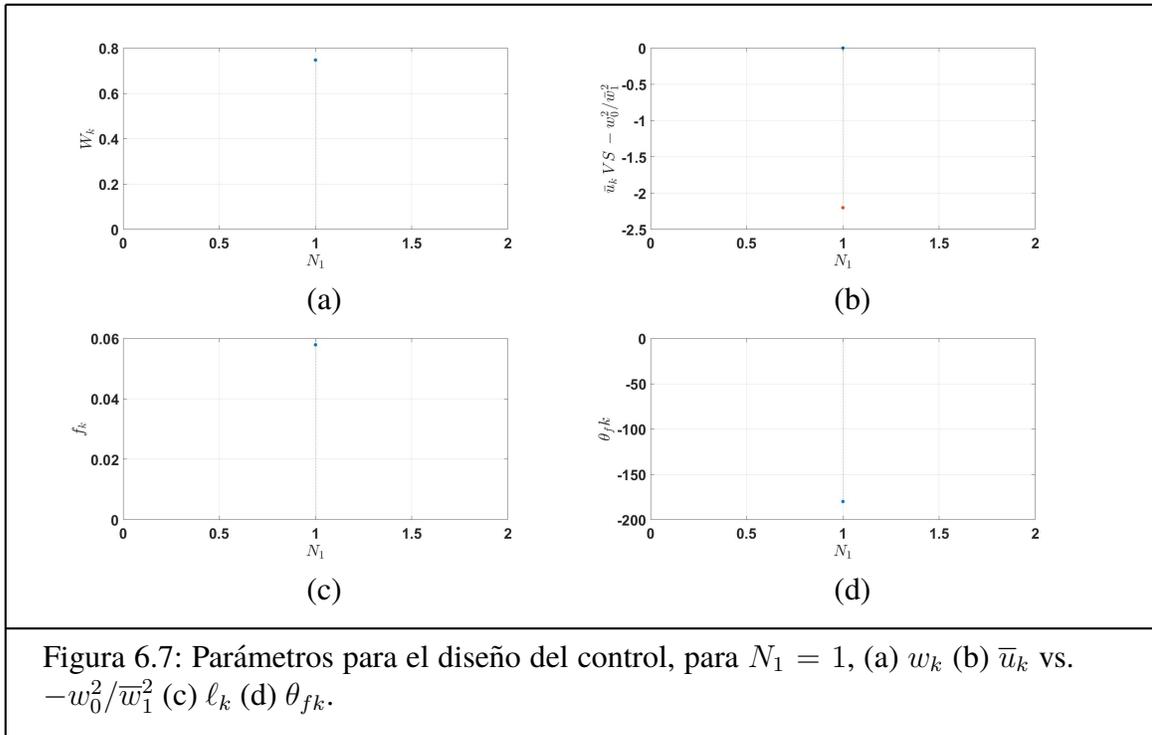
$$M_{k+1} = \begin{bmatrix} 1/(mw_k) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\tilde{\Phi}_k = \exp\left(-\frac{mw_k}{2\hbar}(\vec{x}_k(\Delta) - \vec{x}_{k\ell})M_k^2(\vec{x}_k(\Delta) - \vec{x}_{k\ell})\right).$$

**Paso 4.** Si  $k < N_\ell$ , ir al paso 2.

**Paso 5.** Fin del algoritmo.

A continuación se muestran los resultados obtenidos para las diferentes particiones,  $N_1 = 1$ ,  $N_2 = 10$  y  $N_3 = 100$ , ver respectivamente Figuras 6.7, 6.8, 6.9.



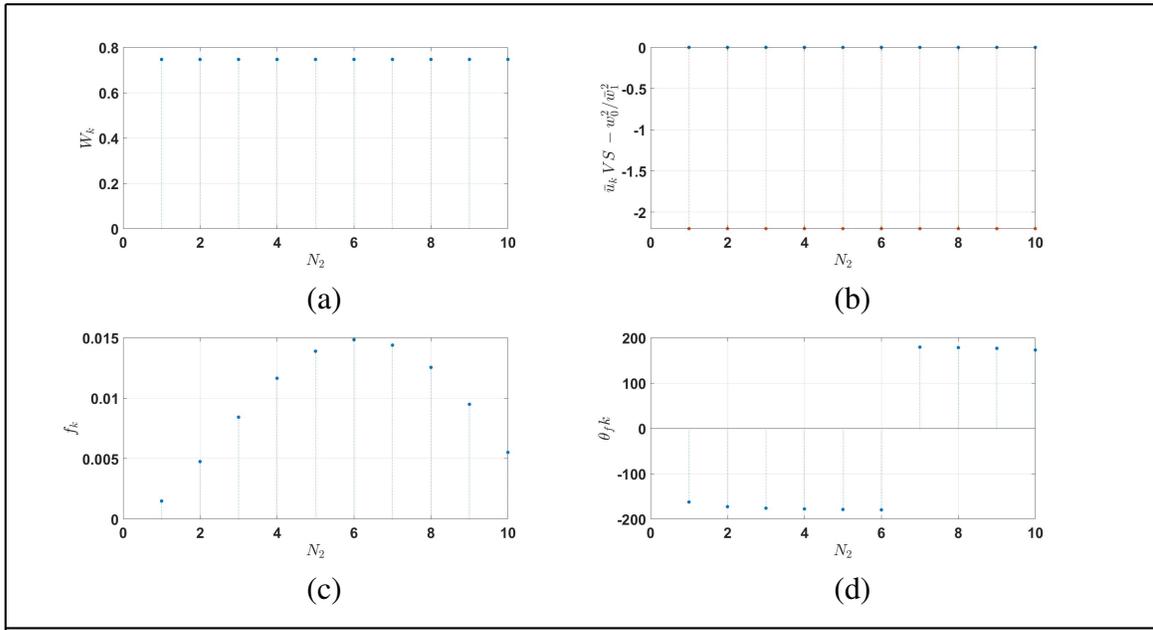


Figura 6.8: Parámetros para el diseño del control, para  $N_2 = 10$ , (a)  $w_k$  (b)  $\bar{u}_k$  vs.  $-w_0^2/\bar{w}_1^2$  (c)  $l_k$  (d)  $\theta_{fk}$ .

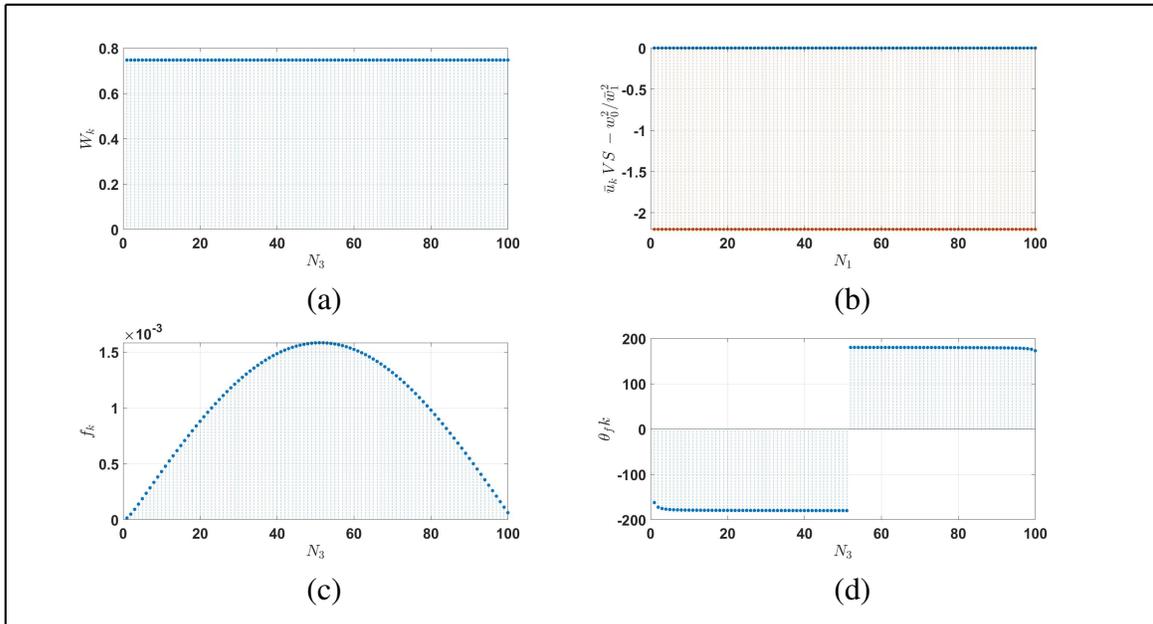


Figura 6.9: Parámetros para el diseño del control, para  $N_3 = 100$ , (a)  $w_k$  (b)  $\bar{u}_k$  vs.  $-w_0^2/\bar{w}_1^2$  (c)  $l_k$  (d)  $\theta_{fk}$ .

De las Figuras 6.7 (c), 6.8 (c), 6.9 (c) se nota que para  $N = 1$ ,  $N = 10$  y  $N = 100$ , respectivamente, la máxima amplitud de la ley de control es  $f_k = 0,06$ ,  $f_k = 0,015$  y  $f_k = 0,0015$ , lo cual concuerda con la discusión de la Sección 5.7.

## 6.2. Simulación

Tomando en cuenta la Sección anterior, se implementó la simulación en SIMULINK. A continuación se presentan los comportamientos del sistema, así como la ley de control óptimo y la funcional asociada. Esto se hace para cada caso incremental tratado anteriormente  $N = 1$ ,  $N = 10$  y  $N = 100$ .

## 6.2.1. Simulación, caso (1) estado de frontera fija

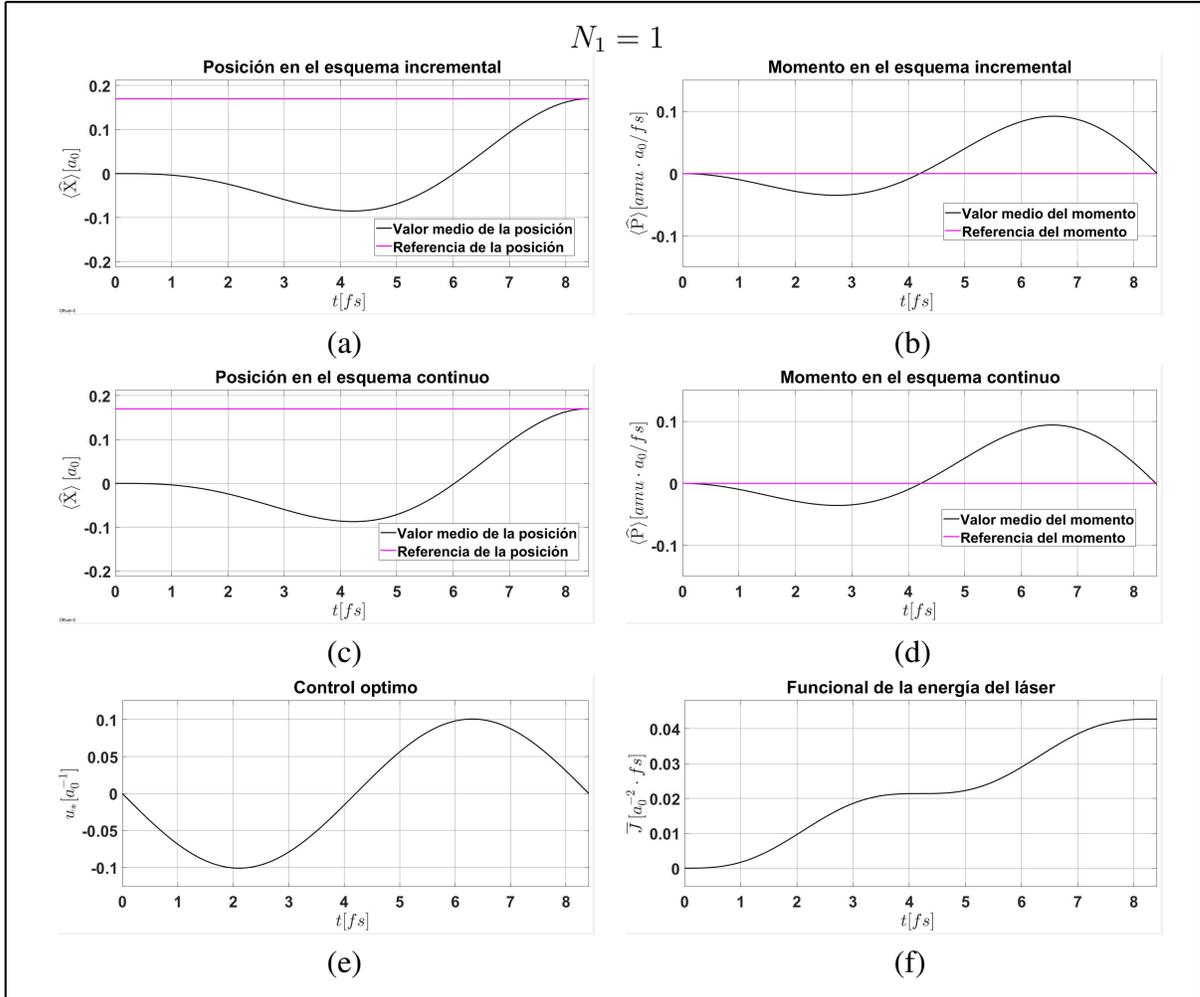
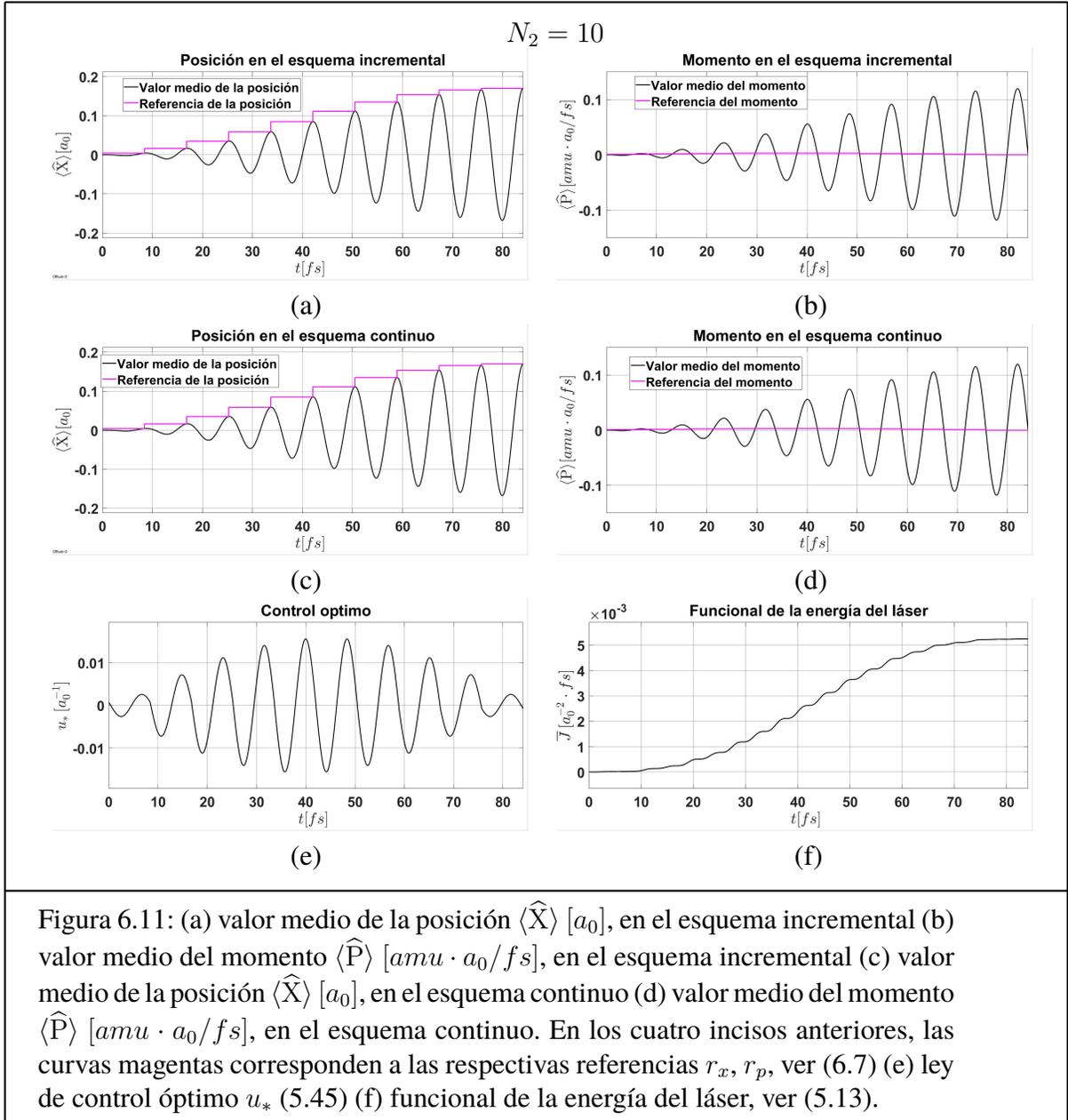
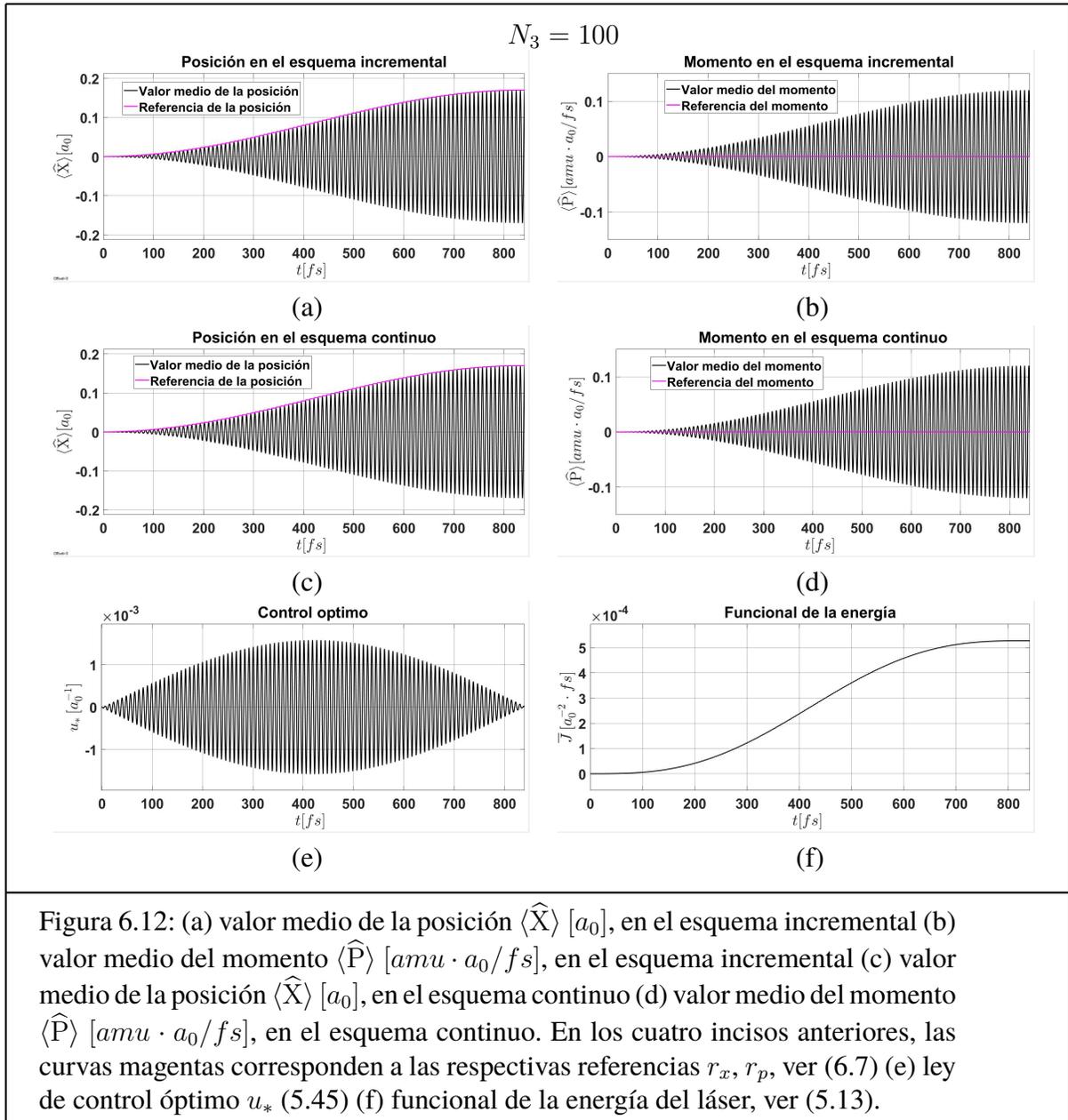
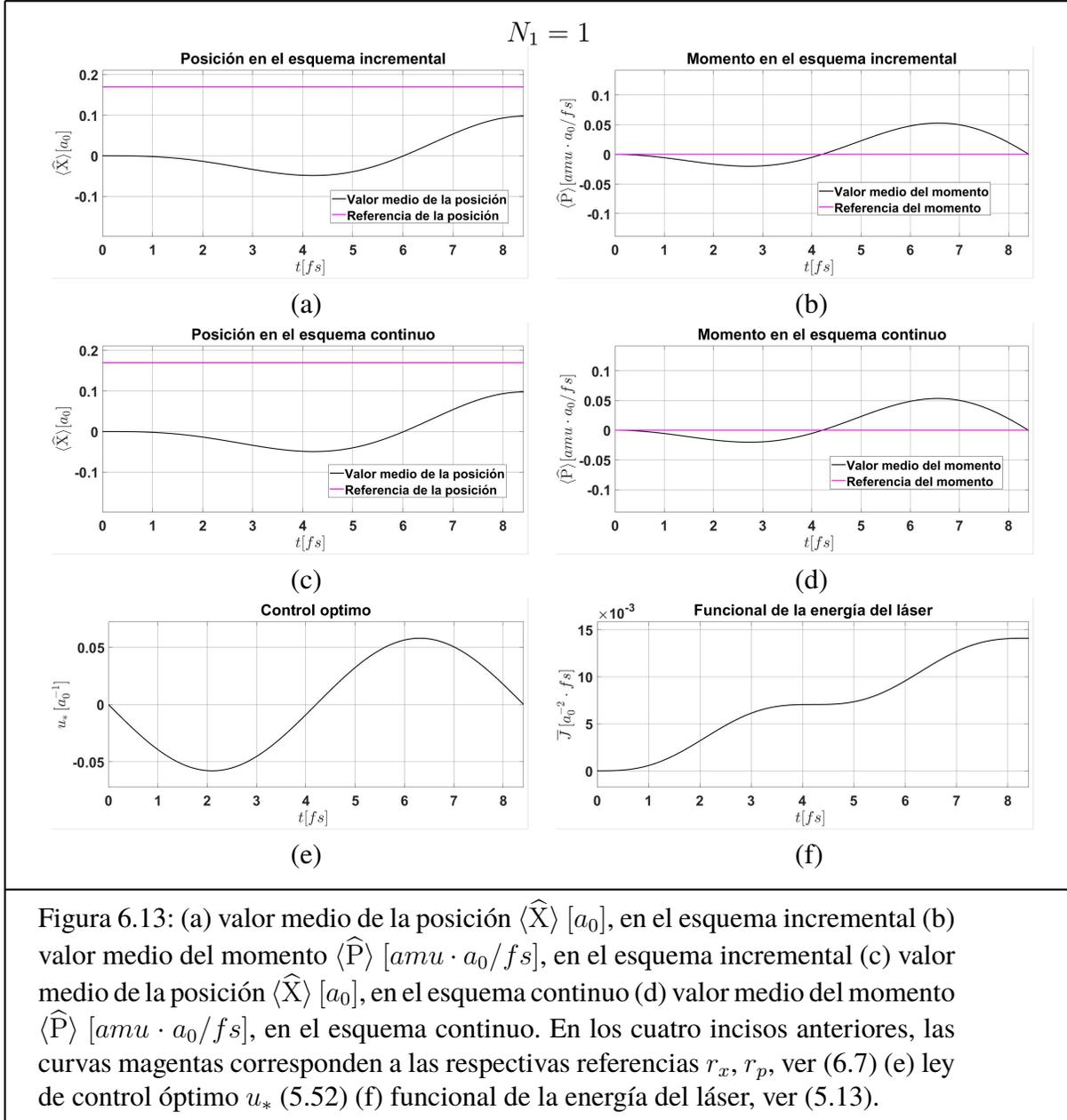


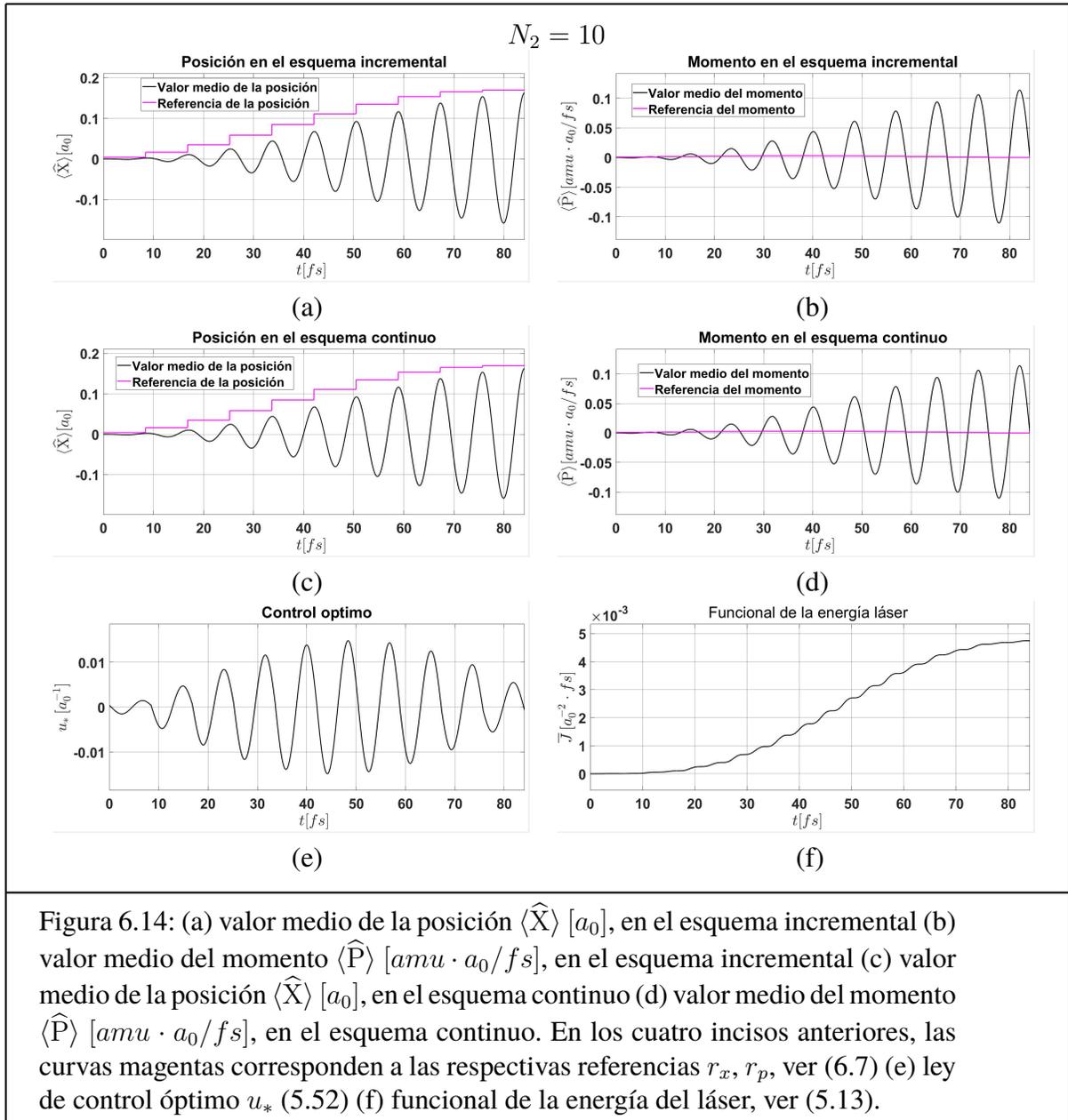
Figura 6.10: (a) valor medio de la posición  $\langle \hat{X} \rangle [a_0]$ , en el esquema incremental (b) valor medio del momento  $\langle \hat{P} \rangle [amu \cdot a_0 / fs]$ , en el esquema incremental (c) valor medio de la posición  $\langle \hat{X} \rangle [a_0]$ , en el esquema continuo (d) valor medio del momento  $\langle \hat{P} \rangle [amu \cdot a_0 / fs]$ , en el esquema continuo. En los cuatro incisos anteriores, las curvas magentas corresponden a las respectivas referencias  $r_x, r_p$ , ver (6.7) (e) ley de control óptimo  $u_*$  (5.45) (f) funcional de la energía del láser, ver (5.13).

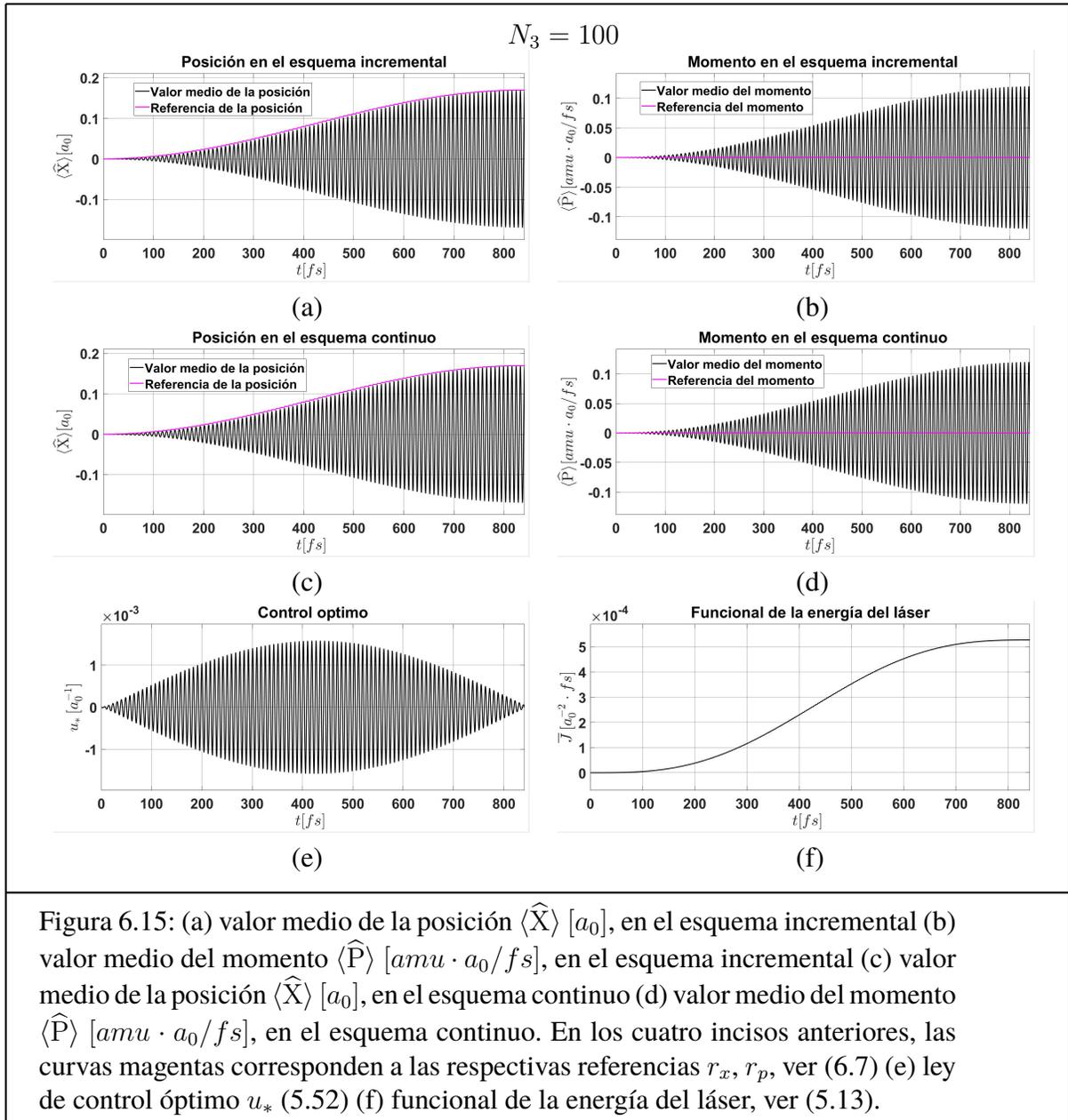




## 6.2.2. Simulación, caso (2) estado de frontera libre







# Capítulo 7

## Conclusión

En la actualidad, se busca diseñar señales láser, de manera óptima, para dirigir moléculas a objetivos específicos, o para manipular la distancia intermolecular, en escalas de tiempo ultrarrápidas (de picosegundos a femtosegundo) [2]. Esto tiene como fin romper o manipular enlaces químicos [2] para ocasionar reacciones químicas mediante el uso del láser, en lugar del uso de insumos químicos. En la literatura, existe un estándar que inició el grupo de investigación de Rabitz en 1988 [8]. Se basa en la aplicación directa de la teoría de control a la ecuación de Schrödinger [8; 9; 10; 11]. Cabe destacar que esta es una ecuación diferencial parcial y, además, compleja. Esto requiere la solución de ecuaciones no lineales acopladas [10]. Además, si bien se logra efectuar el control óptimo mediante simulaciones numéricas, el mismo grupo de Rabitz reportó varios problemas de convergencia [10].

En este contexto, en la presente tesis se controló la distancia intermolecular de una molécula diatómica mediante un pulso láser, cuya energía fue optimizada, así como sus probabilidades de transición. Esto se logró aplicando un algo-

ritmo analítico y fácil de implementar. En particular, se eligió el reciente método Bonilla–Bonilla [1] para diseñar el control óptimo del sistema cuántico en cuestión. El método Bonilla–Bonilla ofrece tres ventajas respecto del método de Rabitz: Para empezar, permite la escritura de una representación de estado de las cantidades estadísticas; es decir, se trabaja con ecuaciones ordinarias y reales. En segundo lugar, el tratamiento de cantidades estadísticas en forma de representación de estado, permite la aplicación de la teoría convencional de control óptimo. Esto implica que su implementación numérica no necesita algoritmos sofisticados, sino que la solución puede obtenerse mediante una paquetería común de simulación, como SIMULINK.

Para lograr el objetivo antes marcado, en la presente tesis, se realizó lo siguiente.

En primer lugar, en el Capítulo 2, se presentaron las herramientas matemáticas básicas de los sistemas cuánticos. Por ejemplo, se recordó el concepto de estado cuántico, así como el de operador cuántico. Se revisó la expresión de los valores medios (2.5). En particular, se vieron los estados coherentes que, por definición, reproducen el comportamiento clásico en promedio (2.12) minimizando la desigualdad de Heisneberg (2.4). También se calculó la probabilidad de transitar de un estado coherente (caracterizado por una amplitud y una fase) a otro estado coherente (caracterizado por otra amplitud y otra fase), ver (2.28).

En el Capítulo 3, se consideró una molécula diatómica caracterizada mediante un potencial de Morse (3.1) y sometida a la acción de un pulso láser, descrito por (3.2) y (3.3). Para la aplicación del método Bonilla–Bonilla, se realizó una aproximación cuadrática del potencial de Morse, alrededor del punto de equilibrio molecular, ver (3.9) y Figuras 3.1 y 3.2. En lugar de trabajar con la ecuación

de Schrödinger (3.17), se aplicó la fórmula (3.18) para obtener la dinámica de las cantidades estadísticas: valores medios de posición y momento, así como las respectivas incertidumbres y correlación. En particular, se formó dos representaciones de estado desacopladas: una para los valores medios (3.52)-(3.55) y otra para las incertidumbres (3.57)-(3.59).

En cuanto al Capítulo 4, se hizo un breve recordatorio sobre la técnica de control óptimo que se utilizó: El regulador cuadrático lineal. Se revisó el control de un sistema dinámico (4.1) para alcanzar una referencia  $\vec{x}_f$ , en tiempo finito  $T$ , minimizando la funcional cuadrática 4.2. La metodología se ilustró en la Tabla 4.1. Se distinguieron dos casos: Por un lado, el control óptimo  $u_*$  para el caso de una frontera fija (4.7). Por otro lado, el control óptimo  $u_*$  para el caso de una frontera libre (4.13). Así mismo se corrieron las respectivas simulaciones en SIMULINK, en la sección 4.2.4.

Ahora bien, en el Capítulo 5, se realizó un horizonte de tiempo finito con una partición (5.5); dentro de cada intervalo de tiempo, se implementó un modelo incremental para los valores medios (5.6) y las incertidumbres (5.7). Las submatrices involucradas se mostraron en (5.8). Además la funcional del criterio a minimizar está dada por (5.21), (5.22) y (5.19). La equivalencia de los comportamientos entre el esquema de Rabitz y Bonilla–Bonilla, se ilustró en la Figura 5.1. En este punto, dado que el problema cuántico se preparó en una forma similar al del Capítulo 4, mediante el método Bonilla–Bonilla, entonces, se adaptó la metodología descrita en el Capítulo 4. Específicamente, se encontró que la ley de control óptimo para el caso de frontera fija está dada por (5.45). En cuanto al caso de frontera libre, la ley de control óptimo corresponde a (5.50).

Finalmente, en el Capítulo 6, se abordan las simulaciones obtenidas en la tesis,

que respaldan los resultados teóricos del Capítulo 5.

- [1] M. Bonilla-Licea and M. Bonilla, “On the behavioral reachability of a confined molecule under laser action,” *IEEE Transactions on Automatic Control*, vol. 69, no. 3, pp. 1689–1696, 2023.
- [2] M. Korolkov, J. Manz, and G. Paramonov, “Theory of ultrafast laser control for state-selective dynamics of diatomic molecules in the ground electronic state: vibrational excitation, dissociation, spatial squeezing and association,” *Chemical physics*, vol. 217, no. 2-3, pp. 341–374, 1997.
- [3] F. L. Lewis, *Optimal control*. John Wiley & Sons, 2012, 118-121.
- [4] L. J. Laforge, F. O. and H. A. Rabitz, “The early era of laser-selective chemistry 1960 1985: Roots of modern quantum control,” *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 14, pp. 5283–5296, 2023.
- [5] W. Ding, J.-P. Sylvestre, E. Bouvier, G. Leclair, and M. Meunier, “Ultrafast laser processing of drug particles in water for pharmaceutical discovery,” *Applied Physics A*, vol. 114, pp. 267–276, 2014.
- [6] E. Nagy, J. Kopniczky, T. Smausz, M. Náfrádi, T. Alapi, J. Bohus, V. Pajer, P. Szabó-Révész, R. Ambrus, and B. Hopp, “A comparative study of femtosecond pulsed laser ablation of meloxicam in distilled water and in air,” *Scientific Reports*, vol. 13, no. 1, p. 10242, 2023.
- [7] D. D’Alessandro, *Introduction to quantum control*. American Institute of Physics, 2008.
- [8] A. P. Peirce, M. A. Dahleh, and H. Rabitz, “Optimal control of quantum-mechanical systems: Existence, numerical approximation, and applications,” *Physical Review A*, vol. 37, no. 12, p. 4950, 1988.

- [9] S. Shi and H. Rabitz, "Optimal control of bond selectivity in unimolecular reactions," *Computer physics communications*, vol. 63, no. 1-3, pp. 71–83, 1991.
- [10] W. Zhu and H. Rabitz, "A rapid monotonically convergent iteration algorithm for quantum optimal control over the expectation value of a positive definite operator," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 109, no. 2, pp. 385–391, 1998.
- [11] W. Zhu, J. Botina, and H. Rabitz, "Rapidly convergent iteration methods for quantum optimal control of population," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 108, no. 5, pp. 1953–1963, 1998.
- [12] J. W. Polderman and J. C. Willems, *Introduction to mathematical systems theory: a behavioral approach*. Springer New York, NY, 1997.
- [13] M. Jammer and E. Merzbacher, "The conceptual development of quantum mechanics," 1967.
- [14] N. Bohr, "On the notions of causality and complementarity 1," *Dialectica*, vol. 2, no. 3-4, pp. 312–319, 1948.
- [15] P. A. M. Dirac, *The principles of quantum mechanics*. Oxford university press, 1981, no. 27.
- [16] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum mechanics*. Paris: Hermann and John Wiley & Sons. Inc., 1977, vol. 1.
- [17] P. u. T. Ehrenfest, *Begriffliche Grundlagen der statistischen Auffassung in der Mechanik*. Springer, 1907.

- [18] A. Goldberg, H. M. Schey, and J. L. Schwartz, "Computer-generated motion pictures of one-dimensional quantum-mechanical transmission and reflection phenomena," *American Journal of Physics*, vol. 35, no. 3, pp. 177–186, 1967.
- [19] S. Shi and H. Rabitz, "Quantum mechanical optimal control of physical observables in microsystems," *The Journal of chemical physics*, vol. 92, no. 1, pp. 364–376, 1990.
- [20] Y. Maday and G. Turinici, "New formulations of monotonically convergent quantum control algorithms," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 118, no. 18, pp. 8191–8196, 2003.
- [21] D. Schuch, *Quantum theory from a nonlinear perspective*. Springer, 2018.
- [22] G. Keller, *Estadística para administración y economía*. Cengage Learning Editores, 2012.
- [23] F. L. Lewis, *Optimal control*. John Wiley Sons, 1992, 157-161.
- [24] J. Combariza, B. Just, J. Manz, and G. Paramonov, "Isomerizations controlled by ultrashort infrared laser pulses: model simulations for the inversion of ligands (h) in the double-well potential of an organometallic compound, [(c5h5)(co) 2feph2]," *The Journal of Physical Chemistry*, vol. 95, no. 25, pp. 10 351–10 359, 1991.
- [25] J. Somló, V. A. Kazakov, and D. J. Tannor, "Controlled dissociation of i2 via optical transitions between the x and b electronic states," *Chemical physics*, vol. 172, no. 1, pp. 85–98, 1993.