



HAL
open science

Contrôle Optimal de la Dynamique Dissipative de Systèmes Quantiques

Cyrill Kontz

► **To cite this version:**

Cyrill Kontz. Contrôle Optimal de la Dynamique Dissipative de Systèmes Quantiques. Physique mathématique [math-ph]. Université de Bourgogne, 2008. Français. NNT : . tel-00325098

HAL Id: tel-00325098

<https://theses.hal.science/tel-00325098>

Submitted on 26 Sep 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université de Bourgogne

Thèse

présentée par

Cyrill KONTZ

pour obtenir le titre de

Docteur en Physique

**Contrôle Optimal de la Dynamique
Dissipative de Systèmes Quantiques**

le 15 septembre 2008

devant la commission d'examen composée de :

A. Keller	Professeur	Rapporteur
G. Turinici	Professeur	Rapporteur
M. Desouter-Lecomte	Professeur	Examineur
B. Lavorel	Directeur de Recherches	Examineur
Dominique Sugny	Maître de Conférences	Directeur de Thèse
H. R. Jauslin	Professeur	Directeur de Thèse

Institut Carnot de Bourgogne - Université de Bourgogne
UMR 5209 CNRS
BP 47870 - 21078 Dijon - France

Remerciements

Je remercie d'abord et surtout Dominique Sugny et Hans Jauslin, mes directeurs de thèse, qui m'ont toujours accompagné, soutenu et épaulé de manière inconditionnelle pendant quatre années. Un immense merci à eux pour leur bienveillance, leur disponibilité et leur sens pédagogique.

Je remercie ensuite Bernard Bonnard, spécialiste du contrôle optimal, dont la rencontre marqua un tournant si décisif dans l'orientation de ma thèse. Je lui dois en particulier l'ensemble des bases mathématiques sur lesquelles repose la majeure partie de cette thèse.

Merci également à Ugo Boscain pour notre discussion sur le contrôle en temps minimum, et à Jean-Baptiste Caillaux pour m'avoir éclairé sur divers aspects de la théorie du contrôle optimal.

D'une manière plus générale, je remercie l'Institut Carnot de Bourgogne pour m'avoir accueilli, ainsi que l'ensemble des chercheurs du laboratoire pour leur amabilité.

Je remercie Arne Keller et Gabriel Turinici d'avoir rapporté sur mon manuscrit, Michèle Desouter-Lecomte d'avoir accepté de faire partie du jury, et enfin Bruno Lavorel pour avoir présidé ce jury.

Sur un plan plus personnel, je remercie toute ma famille et mes amis : Fred, Damien, Romain, Maurice, Pascal, Arnaud, Eric, Olivier, Aymeric, Billal, Fabrice, Joe, Omar, Houria, François, Arsène...

Pour terminer, je remercie Maryline pour les raisons qu'elle sait.

Dijon, septembre 2008

*Il est toujours aisé d'être logique.
Il est presque impossible d'être logique jusqu'au bout.
Albert Camus*

Table des matières

Introduction Générale	9
1 Dynamique des Systèmes Quantiques Ouverts	15
1.1 Description d'un Système Ouvert	16
1.2 Formalisme de l'Opérateur Densité	17
1.2.1 Définition	18
1.2.2 Interpretation Statistique	18
1.2.3 Cas d'un Système Ouvert	19
1.3 Dynamique Markovienne des Systèmes Ouverts	20
1.3.1 Théorie des Opérations Quantiques	21
1.3.2 Equation Pilote de Lindblad	22
1.3.3 Théorie Phénoménologique de la Relaxation	25
1.4 Cas du Système à 2 Niveaux	26
1.4.1 Représentation : Vecteur de Bloch	27
1.4.2 Evolution : Forme de Redfield	28
2 Alignement Moléculaire en Milieu Dissipatif	31
2.1 Modélisation et Enoncé du Problème	32
2.1.1 Interaction Matière-Rayonnement	32
2.1.2 Alignement d'une Molécule Diatomique	35
2.2 Stratégie de Contrôle	38
2.2.1 Etat Initial d'Equilibre	39
2.2.2 Etat Cible	39
2.2.3 Approximation Soudaine	41
2.3 Résultats et Analyse	41
2.3.1 Stratégie du Maximum	42
2.3.2 Algorithme Génétique	44
2.3.3 Analyse Comparative des Résultats	45

3	Introduction à la Théorie du Contrôle Optimal	47
3.1	Systèmes Contrôlés et Ensemble Accessible	48
3.1.1	Concepts de la Théorie des Equations Différentielles . . .	48
3.1.2	Les Systèmes Dynamiques Contrôlés	49
3.1.3	Ensemble Accessible et contrôlabilité	51
3.2	Le Problème du Contrôle Optimal	53
3.2.1	Les Coûts Temps et Energie	53
3.2.2	Le Principe du Maximum de Pontryagin	54
3.3	Exemple : Trajectoires « Bang-Bang »	57
4	Modélisation et Contrôlabilité des Systèmes à N Niveaux	61
4.1	Hamiltonien d'Interaction RWA	61
4.1.1	Représentation d'Interaction	62
4.1.2	Approximation RWA	63
4.2	Contrôlabilité des Systèmes à N Niveaux	64
4.2.1	Notions de Contrôlabilité	64
4.2.2	Cas des Systèmes Fermés	65
4.2.3	Cas des Systèmes Ouverts	66
4.3	Equations Dynamiques Contrôlées	66
4.3.1	Cas des Systèmes Fermés	66
4.3.2	Cas des Systèmes Ouverts	68
5	Synthèse Optimale en Temps Minimum d'un Système à 2 Niveaux	71
5.1	Etude Théorique de la Synthèse Optimale	72
5.1.1	Application du Principe du Maximum	72
5.1.2	Le Cas Ordinaire	75
5.1.3	Le Cas Singulier	77
5.2	Application à un Système Dissipatif à 2 Niveaux	81
5.2.1	Calcul des X- et Y- Trajectoires	82
5.2.2	Courbes de Singularité et de Colinéarité	83
5.2.3	Ensemble Accessible	84
5.3	Exemples de Synthèses Optimales	86
6	Contrôle Optimal Assisté d'une Mesure	93
6.1	Description du Processus	94
6.1.1	Représentation des Etats et Contrôlabilité	95
6.1.2	Mesure et Définition du Coût	96
6.2	Le Modèle de Grushin sur la Sphère	98
6.3	Mise en Oeuvre du Processus	101
6.3.1	Cas (a)	103

6.3.2	Cas (b)	106
6.3.3	Cas (c)	107
6.3.4	Cas (d)	108
Conclusion et Perspectives		111

Introduction Générale

La théorie de l'électromagnétisme de Maxwell (1865), marque un point crucial pour la compréhension des mécanismes d'interaction entre la lumière et la matière, en fournissant un modèle ondulatoire complet des lois fondamentales de l'électricité et du magnétisme à l'échelle macroscopique. Elle a permis, avec la découverte par Hertz en 1888 des ondes qui portent maintenant son nom, un élan considérable dans le domaine de la communication. La théorie de l'électromagnétisme a également ouvert la porte à deux disciplines piliers de la physique moderne : l'étude du rayonnement du corps noir par Planck (1900) est une des bases du développement de la physique quantique, tandis que l'invariance de la vitesse de la lumière est le point de départ de la relativité d'Einstein (1915).

Cependant, à cause de la nature non cohérente et peu sélective (tant du point de vue spatial que fréquentiel) des sources lumineuses dont on dispose à l'époque, la matière reste difficile à sonder à l'échelle microscopique.

Avec la découverte de l'émission stimulée, suivie de l'apparition des premiers lasers (1960), sources de lumière intenses, cohérentes et directionnelles, commence alors à se développer l'investigation de la matière à l'échelle microscopique.

Aujourd'hui, l'étude des processus d'interaction matière-laser s'est beaucoup développée et possède un vaste champ d'applications allant de la théorie quantique fondamentale [18], au développement des nouvelles technologies à l'échelle mésoscopique [17]. Dans ce contexte, une idée séduisante et ambitieuse voit le jour. En admettant que l'on sache décrire correctement les effets dynamiques de l'interaction matière-laser, on peut envisager d'irradier la matière avec un rayonnement dont on manipule à volonté les paramètres, afin d'entraîner la matière dans un état préalablement défini. Ainsi est né le *contrôle quantique*. [22, 23, 24, 25]

D'une manière générale, un système est dit contrôlé lorsque sa loi d'évolution peut être modifiée de manière arbitraire et extérieure au système. Le but du contrôle quantique est de trouver une stratégie permettant de manipuler l'évolution du système pour le conduire d'un état préalablement connu (pré-

paration) à un état souhaité (cible). Le problème fondamental du contrôle quantique est alors de trouver la forme du laser permettant de réaliser cet objectif. La cible peut être désignée aussi bien de manière directe, comme en information quantique où on considère des préparations spécifiques précises, ou encore comme au cours du refroidissement ou du piégeage d'atomes par laser où on veut contrôler les populations ; que de manière indirecte comme dans le cas de l'orientation ou de l'alignement moléculaire où la cible est définie comme étant l'état qui maximise la valeur moyenne d'une certaine observable.

Diverses méthodes de contrôle quantique ont été développées ces cinquante dernières années, et deux critères peuvent être donnés pour comparer ces diverses méthodes :

- une cible peut parfois ne pas être exactement atteinte, et plus un champ de contrôle permet de se rapprocher d'une cible, plus il est dit *efficace* ;
- au cours d'une expérience réelle, le champ de contrôle est toujours soumis à de faibles variations par rapport aux paramètres idéaux, et un processus est dit *robuste* lorsque ces variations n'entraînent pas un changement drastique de comportement du système.

Dans le *régime adiabatique*, où l'enveloppe du champ électrique est supposée lentement variable par rapport au temps caractéristique d'évolution du système contrôlé, on peut effectuer, notamment grâce à la technique STIRAP [19, 20, 21], des transferts de populations efficaces de manière très robuste, mais aussi caractériser ces processus de transfert par la topologie des surfaces d'énergies propres [5, 6].

Dans l'*approximation soudaine* [29, 30], au contraire, les variations typiques du champ sont très rapides devant le temps caractéristique d'évolution du système contrôlé. Cette stratégie, relativement moins employée que le transfert adiabatique, se révèle assez judicieuse dans le cas des systèmes dissipatifs, où l'on agit dans des délais temporels suffisamment courts pour espérer ne pas laisser aux effets souvent négatifs de la dissipation l'occasion de trop se manifester.

Il existe également des méthodes numériques de détermination du champ. Par exemple, les *algorithmes génétiques* [26, 27, 28], sont des méthodes itératives de construction par sélection naturelle (au sens de Darwin) de solutions approchées d'un problème d'optimisation. De telles méthodes présentent l'avantage d'être systématiques — dans la mesure où l'algorithme demeure le même pour tout problème — et robustes, mais fournissent en général des profils de champs complexes à analyser.

Malgré toutes ces approches, la richesse et la complexité des phénomènes intervenant dans les processus d'interactions matière-laser est telle qu'il existe relativement peu de méthodes purement analytiques.

Pour se familiariser avec quelques-unes de ces méthodes, on a participé à l'étude du contrôle par champ laser du radical méthoxy de H_3CO [1]. Une telle molécule autorise, grâce aux symétries particulières de sa surface d'énergie potentielle, une grande variété de processus physico-chimiques tels que l'isomérisation ou l'effet tunnel. Dans cet article, on a procédé à l'analyse théorique du contrôle sous deux approches : l'optimisation au sens de Rabitz [36, 37, 38, 39], et une extension de la technique STIRAP. Les deux méthodes fournissent deux formes de contrôle bien différentes, qui ne peuvent être déduites l'une de l'autre. Il a également été montré que la robustesse de la technique STIRAP est fortement corrélée avec le délai entre les impulsions du champ de contrôle. En parallèle du contrôle quantique s'est développée de manière indépendante la théorie mathématique des *systèmes contrôlés* [32, 33]. Et bien que les problèmes de contrôle soient au centre des préoccupations des ingénieurs depuis l'antiquité, c'est encore Maxwell qui, en 1868, propose la première analyse rigoureuse en terme d'équations différentielles d'un système contrôlé [7]. Les premiers travaux concernant la théorie des systèmes ont dans un premier temps essentiellement tourné autour de l'analyse de stabilité, domaine dans lequel Lyapunov apporta la contribution majeure (1893) [31].

Sous l'impulsion de la révolution industrielle, qui voit l'avènement des machines automates, débute la période dite *classique* [8] de la théorie des systèmes. Les systèmes sont vus comme des boîtes noires possédant un certain nombre d'entrées et de sorties, et sont alors décrits à l'aide de fonctions de transfert. A cette époque, on abordait de tels systèmes par une analyse dans le domaine fréquentiel, où les transformations de Fourier et de Laplace jouent un rôle central. Parmi les divers aspects qui caractérisent la théorie du contrôle (régulation, fluctuation, stabilité...), se distingue le concept d'*optimisation*, dont l'objectif est de trouver les valeurs particulières des variables du système permettant de maximiser un profit, ou de minimiser un coût.

A partir de 1960, à la suite des travaux de Bellman sur la programmation dynamique, et après la publication du principe du maximum par Pontryagin, la théorie du contrôle des systèmes entre dans la période *moderne* [8] et est abordée dans le domaine temporel de manière algébrique et géométrique. Dans le cadre de la théorie des équations différentielles, un système contrôlé est décrit par une famille de champ de vecteurs agissant sur un espace des états que peut adopter le système.

Sous ce point de vue moderne, la théorie du contrôle optimal est pluridisciplinaire : elle s'appuie sur des concepts géométriques (topologie, géométrie différentielle), algébriques (théorie des groupes de Lie) et analytiques (étude

des systèmes Hamiltoniens), aussi bien que sur des éléments de théorie des probabilités (théorie de la mesure). En effet, l'étude d'un problème de contrôle optimal, qui est correctement défini par la donnée d'un système contrôlé et d'un critère de coût à optimiser, doit répondre à deux questions. D'abord, pour une condition initiale donnée, quel est l'ensemble des états accessibles? L'étude des propriétés de l'algèbre de Lie du système permet de répondre à cette première question. Ensuite, quel contrôle en particulier permet de mener cette condition initiale à une condition finale fixée tout en minimisant le coût? Le principe du maximum de Pontryagin (PMP) fournit des conditions nécessaires d'optimalité, en montrant que les solutions optimales recherchées sont contenues dans l'ensemble des solutions extrémales d'un problème plus large de nature Hamiltonienne.

Aujourd'hui, la théorie du contrôle optimal possède un grand nombre d'applications dans les domaines de l'économie [11, 12], de l'ingénierie [9, 10], et des mathématiques appliquées [16]. En physique, le PMP a notamment beaucoup été employé dans des problèmes de mécanique céleste [13, 14, 15], mais encore relativement peu dans le domaine de la mécanique quantique.

L'objet de cette thèse est l'étude du contrôle optimal de la dynamique des systèmes quantiques ouverts. Son thème central est l'application des techniques issues de la théorie mathématique du contrôle optimal sur des systèmes quantiques dissipatifs de dimension finie. Au cours des six chapitres composant ce rapport, on cherchera avant tout à mettre en avant :

- l'équation pilote de Lindblad, qui est l'équation d'évolution générale des systèmes ouverts dans l'approximation de Born-Markov ;
- la structure géométrique des problèmes considérés, celle-ci est intimement liée au concept de contrôlabilité ;
- la forme des séquences de contrôle permettant de réaliser la minimisation du critère de coût définissant le problème de contrôle optimal ;
- le rôle tantôt négatif, tantôt positif de la dissipation créée par l'environnement lors d'un processus de contrôle.

Les systèmes considérés seront des modèles suffisamment simples pour appréhender et comprendre les principaux phénomènes physiques auxquels on s'intéresse.

Dans le domaine de l'optique quantique, les processus d'interaction entre la matière et la lumière sont nombreux et complexes. Pour cette raison, il convient dès à présent de préciser le champ d'investigation auquel on se restreint pour se ramener à des modèles simples mais qui décrivent une bonne partie de la dynamique étudiée. Par système quantique, on entend dans ce travail, un système à N niveaux discrets, toujours supposé de dimension fi-

nie, qui peut être interprété comme le spectre des états liés d'un atome ou d'une molécule. Le rayonnement laser quant à lui n'est pas décrit quantiquement : on se place dans la limite où il possède un très grand nombre de photons afin de le traiter classiquement. Cette approximation permet de décrire avec une excellente précision de nombreux effets liés à la lumière laser. Pour cette raison, les Hamiltoniens d'interaction que l'on utilise sont qualifiés de semi-classiques. Typiquement, on décrira le rayonnement laser par une superposition d'ondes planes progressives monochromatiques modulées, dont la fréquence de la porteuse est en résonance avec l'énergie de transition du phénomène que l'on souhaite contrôler. En ce qui concerne la nature des phénomènes décrits, on se limitera à des mécanismes non relativistes et toujours linéaires, à l'exception du contrôle de l'alignement présenté dans le second chapitre qui repose sur un effet d'ordre 2. Enfin, pour alléger la notation, on utilise le système d'unités atomiques où $\hbar = 1$.

Ce rapport de thèse s'articule en six chapitres.

Le premier chapitre rappelle les éléments essentiels de la dynamique des systèmes quantiques ouverts qui sont les systèmes auxquels on va principalement s'intéresser. Dans le cadre du formalisme de l'opérateur densité, l'évolution de tels systèmes, de nature irréversible et décohérente, est décrite par l'équation pilote de Lindblad.

Le second chapitre propose un premier exemple de contrôle quantique : l'alignement moléculaire en milieu dissipatif. L'objectif est d'augmenter la densité de probabilité de présence des états rotationnels d'une molécule linéaire autour d'une direction privilégiée de l'espace. On montre comment obtenir un tel résultat à l'aide d'un train d'impulsions laser ultra-courtes, en s'appuyant sur l'exemple concret d'une molécule diatomique CO en collision avec les molécules d'un gaz d'Argon environnant.

Le troisième chapitre propose une introduction à la théorie mathématique du contrôle optimal, qui est l'outil mathématique que l'on va employer pour résoudre une nouvelle classe de problèmes en contrôle quantique. L'objectif est de déterminer, parmi l'ensemble de toutes les trajectoires permises, laquelle minimise un critère de coût donné. En adoptant un point de vue géométrique, le principe du maximum de Pontryagin énonce qu'une telle trajectoire, dite optimale, est nécessairement l'extrémale d'un problème associé de structure Hamiltonienne.

Le quatrième chapitre traite de la modélisation de la classe de systèmes quantiques sur lesquels on va appliquer la théorie du contrôle optimal. On envisagera des systèmes à N niveaux où seuls sont couplés, par un ensemble de $2N - 2$ lasers polarisés linéairement, les états d'énergies voisines. On peut énoncer pour de tels systèmes divers résultats sur la contrôlabilité, c'est-à-

dire la capacité de pouvoir conduire le système contrôlé dans n'importe quel autre état.

Le cinquième chapitre présente la synthèse optimale en temps minimum d'un système à 2 niveaux en milieu dissipatif. On appelle synthèse optimale la résolution d'un problème de contrôle optimal où la cible n'est pas fixée, autrement dit on détermine l'intégralité des séquences de contrôle permettant d'atteindre n'importe quel état de l'ensemble accessible.

Le sixième chapitre présente une solution possible au problème de la non-contrôlabilité. Pour atteindre un état a priori non accessible par la dynamique contrôlée, on peut envisager de faire une mesure sur le système. Ce faisant on élargit l'ensemble des états accessibles par une opération de projection de type von Neumann. Pour illustrer ce concept, on envisage un système modèle fermé à 3 niveaux dont la symétrie ne permet pas une complète contrôlabilité. Puis on propose plusieurs situations au cours desquelles le processus de mesure joue un rôle déterminant.

Les travaux présentés dans ce rapport de thèse ont fait l'objet de quatre publications dans la revue internationale *Physical Review A* dont voici les références :

D. Sugny, C. Kontz, M. Ndong, Y. Justum, G. Dive, et M. Desouter-Lecomte, *Laser control in a bifurcating region*, Phys. Rev. A **74**, 043419 (2006),

D. Sugny, C. Kontz et H. R. Jauslin, *Target states and control of molecular alignment in a dissipative medium*, Phys. Rev. A **74**, 053411 (2006),

D. Sugny, C. Kontz et H. R. Jauslin, *Time-optimal control of a two-level dissipative quantum system*, Phys. Rev. A **76**, 023419 (2007),

D. Sugny et C. Kontz, *Optimal control of a three-level quantum system by laser fields plus von Neumann measurements*, Phys. Rev. A **77**, 063420 (2008).

Chapitre 1

Dynamique des Systèmes Quantiques Ouverts

En mécanique quantique, on étudie les systèmes ouverts pour différentes raisons. D'abord de tels modèles sont plus réalistes, et sont capables de rendre compte du caractère irréversible de certaines transformations d'un système soumis aux forces extérieures décohérentes de son environnement. En particulier, toute source de rayonnement lumineux est un système ouvert : une approche prenant en compte la dissipation est donc justifiée pour décrire les interactions matière-laser qui font l'objet de cette thèse [54, 55, 47]. Il est aussi connu qu'un couplage avec l'environnement mime l'effet d'une mesure continue sur un système quantique, l'étude des systèmes ouverts offre donc une piste de choix pour la question si essentielle du processus de mesure [56, 48].

Traditionnellement, on modélise un système ouvert par un système interagissant avec son environnement : c'est de cette manière que Pauli, dès 1928, écrit la première équation pilote en mécanique quantique et énonce la fameuse règle d'or de Fermi [41]. Il existe plusieurs théories des systèmes ouverts qui se distinguent selon la force de couplage avec l'environnement considéré et les effets de mémoire mis en jeu. En suivant l'idée originale de Redfield dans le contexte de la RMN [42], on s'intéresse ici aux systèmes faiblement couplés et sans mémoire : les *systèmes de Born-Markov*.

Ce chapitre s'articule en quatre sections. La première section présente de manière qualitative les systèmes interagissant faiblement avec un environnement de très grande dimension. La seconde section s'intéresse à la représentation des états de tels systèmes, qui ne peuvent plus être décrit par un vecteur d'état, mais grâce au formalisme plus général de l'opérateur densité. Dans la troisième section, on établit de manière succincte l'équation pilote de Lind-

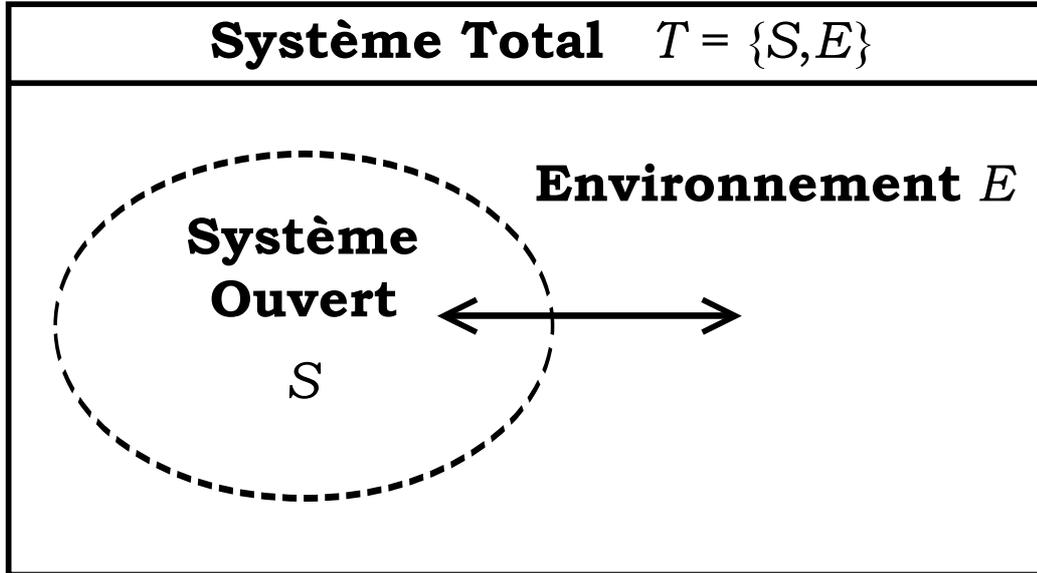


FIG. 1.1 – Représentation schématique d'un système ouvert.

blad, qui sert à modéliser les systèmes dissipatifs des chapitres suivants. On termine avec l'illustration sur l'exemple du système à 2 niveaux des concepts développés dans les précédentes sections.

L'étude des systèmes ouverts en mécanique quantique est une discipline encore jeune et incontestablement complexe, c'est pour cette raison que la littérature n'est pas très abondante dans cette discipline. Les ouvrages [48, 43, 57, 58, 47, 44, 45, 46] ont servi à l'écriture de ce chapitre.

1.1 Description d'un Système Ouvert

On considère deux systèmes physiques *en contact*, c'est-à-dire susceptibles d'interagir par échanges d'énergie¹. Le premier, noté S , auquel on associe l'espace de Hilbert $\mathcal{H}^{(S)}$ de dimension N finie, est le système étudié, dont on souhaite décrire la dynamique des états. Le second, noté E , auquel on associe l'espace de Hilbert $\mathcal{H}^{(E)}$ ² de dimension très grande par rapport à N , représente l'environnement extérieur au système S , dont on abandonne l'idée de toute description. Typiquement, l'environnement E consiste en un grand réservoir d'énergie dans un état d'équilibre.

¹aucun échange de matière n'est ici envisagé

²ou plus précisément un *espace de Fock* [43] si on a besoin de prendre en compte les propriétés de symétrie des bosons ou des fermions constituant le bain

Le système total $T = \{S, E\}$, qualifié de *bipartite*, est toujours supposé fermé. Conformément aux postulats de la mécanique quantique, on lui associe l'espace de Hilbert produit tensoriel $\mathcal{H}^{(T)} = \mathcal{H}^{(S)} \otimes \mathcal{H}^{(E)}$.

Si $\{|\varphi_k^{(S)}\rangle\}$ et $\{|\varphi_l^{(E)}\rangle\}$ sont respectivement des bases orthonormées des espaces $\mathcal{H}^{(S)}$ et $\mathcal{H}^{(E)}$, alors l'espace de $\mathcal{H}^{(T)}$ est engendré par l'ensemble des combinaisons linéaires des vecteurs $|\varphi_k^{(S)} \varphi_l^{(E)}\rangle = |\varphi_k^{(S)}\rangle \otimes |\varphi_l^{(E)}\rangle$.

On distingue alors deux types d'états appartenant à $\mathcal{H}^{(T)}$. Un état $|\Psi_T\rangle \in \mathcal{H}^{(T)}$ est dit *séparable* s'il existe deux vecteurs $|\Psi_S\rangle \in \mathcal{H}^{(S)}$ et $|\Psi_E\rangle \in \mathcal{H}^{(E)}$ tels que :

$$|\Psi_T\rangle = |\Psi_S\rangle \otimes |\Psi_E\rangle, \quad (1.1)$$

dans le cas contraire, l'état $|\Psi_T\rangle$ est dit *intriqué*.

Dans les processus que l'on décrira par la suite, le système S est contrôlé, ce qui signifie qu'il est lui-même composé de deux parties : l'atome ou la molécule à contrôler, et le champ laser de contrôle. A cela s'ajoutent certains effets dissipatifs qui peuvent avoir deux origines distinctes :

- soit l'atome ou la molécule subit de nombreuses collisions avec les atomes constituant le fluide dans lequel il évolue,
- soit la cavité optique contenant le bain de photon du champ laser de contrôle est imparfaite, ce qui entraîne une fuite d'énergie vers l'extérieur.

De manière empirique, on sait que la dynamique d'un système ouvert présente trois caractéristiques essentielles :

- elle est *décohérente*, ainsi un système ouvert n'est pas nécessairement dans un état pur, mais peut-être de manière plus générale dans un mélange statistique d'états purs : les états d'un système ouvert sont représentés par des opérateurs densité (voir section 1.2),
- elle est *dissipative* et *irréversible*, ce qui signifie qu'on ne peut plus espérer décrire son action par des opérateurs d'évolution unitaire dont la caractéristique est précisément de conserver l'énergie : la dynamique des systèmes ouverts que l'on considère est donnée par l'équation de Lindblad (voir section 1.3).

1.2 Formalisme de l'Opérateur Densité

On rappelle dans cette section quelques notions fondamentales de la théorie de l'opérateur densité utiles à l'étude des systèmes ouverts. Dans un premier temps, on donne la définition mathématique de l'opérateur densité, objet que l'on interprète physiquement de manière équivalente comme un mélange

statistique d'états purs, ou comme la trace partielle d'un système bipartite sur les modes de l'environnement.

1.2.1 Définition

L'opérateur densité est un objet de nature statistique donnant la représentation la plus générale de l'état d'un système quantique [49].

Soit \mathcal{H} l'espace de Hilbert de dimension N finie associé au système physique considéré. On appelle *opérateur densité* ρ tout opérateur linéaire agissant sur \mathcal{H} vérifiant les trois propriétés suivantes :

1. hermiticité : $\rho^\dagger = \rho$,
2. trace unité : $\text{Tr}[\rho] = 1$,
3. positivité : pour tout $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$: $\langle \Psi | \rho | \Psi \rangle \geq 0$.

On note $\mathcal{D}(\mathcal{H})$ l'ensemble des opérateurs densité agissant sur \mathcal{H} .

La quantité $\text{Tr}[\rho^2]$ est appelée *pureté* du système, et d'après les propriétés caractéristiques de l'opérateur densité :

$$\text{Tr}[\rho^2] \leq 1, \quad (1.2)$$

où l'égalité est vérifiée si et seulement si le système est dans un état pur. Ainsi, dans ce formalisme, un état pur est caractérisé par un opérateur densité idempotent (c'est-à-dire tel que $\rho^2 = \rho$), et cet opérateur densité est alors un opérateur de projection sur l'état pur $|\Psi\rangle$ qu'il représente :

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|. \quad (1.3)$$

1.2.2 Interpretation Statistique

Une conséquence importante de la propriété d'hermiticité de l'opérateur densité est que cet opérateur est diagonalisable dans une base orthonormée de vecteurs propres $\{|\varphi_m\rangle\}$, et que ses valeurs propres λ_m sont réelles. C'est-à-dire que l'opérateur ρ admet la décomposition spectrale :

$$\rho = \sum_m \lambda_m |\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|, \quad (1.4)$$

où en vertu des propriétés de positivité et de trace unité, les valeurs propres vérifient nécessairement :

$$0 \leq \lambda_m \leq 1 \quad \text{et} \quad \sum_m \lambda_m = 1. \quad (1.5)$$

Ainsi, tout opérateur densité peut s'interpréter comme un mélange statistique d'états purs [53] : on ignore dans quel état le système se trouve précisément, mais on peut affirmer qu'on a une probabilité λ_1 qu'il soit dans l'état $|\varphi_1\rangle$, une probabilité λ_2 qu'il soit dans l'état $|\varphi_2\rangle$, etc. . .

Cependant, cette interprétation n'est pas unique. En effet, on peut définir le même opérateur densité (1.4) que précédemment à partir d'un mélange statistique quelconque, obtenu au moyen d'une transformation unitaire U définissant les états $\{|\Psi_n\rangle\}$ par :

$$\sqrt{p_n}|\Psi_n\rangle = \sum_m U_{nm} \sqrt{\lambda_m} |\varphi_m\rangle, \quad (1.6)$$

où les états $\{|\Psi_n\rangle\}$ ne sont pas nécessairement orthogonaux, et l'on a d'une manière générale :

$$\rho = \sum_n p_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|, \quad \text{avec} \quad \sum_n p_n = 1. \quad (1.7)$$

Sous forme matricielle, l'opérateur densité est appelé *matrice densité* : ses éléments diagonaux sont les *populations*, et ses éléments extra-diagonaux sont les *cohérences*³.

1.2.3 Cas d'un Système Ouvert

On se place à nouveau dans la situation décrite dans la section 1.1 où l'on représente les états des systèmes S , E et T par leurs matrices densité respectives $\rho^{(S)}$, $\rho^{(E)}$ et $\rho^{(T)}$.

Pour des raisons de consistance physique, on requiert que la valeur moyenne de l'observable A agissant sur $\mathcal{H}^{(S)}$ soit identique à celle de l'observable $A \otimes \mathcal{I}_E$, où \mathcal{I}_E est l'opérateur identité dans l'espace $\mathcal{H}^{(E)}$, agissant sur $\mathcal{H}^{(T)}$. Cette considération conduit à la définition :

$$\rho^{(S)} = \text{Tr}_E[\rho^{(T)}], \quad (1.8)$$

c'est-à-dire que l'on définit l'opérateur densité $\rho^{(S)}$ décrivant uniquement le système S en effectuant l'opération de projection⁴, appelée *trace partielle* du système T sur les états de l'environnement [40].

³la définition des populations et des cohérences dépend donc du choix de la base de la représentation matricielle.

⁴la propriété d'idempotence de la définition (1.8) est évidente

Lorsque le système total T est dans un état pur $|\Psi_T\rangle$, l'opération de trace partielle se développe comme suit :

$$\rho^{(S)} = \sum_{k,k'} \sum_l |\varphi_{k'}^{(S)}\rangle \langle \varphi_l^{(E)} \varphi_{k'}^{(S)} | \Psi_T \rangle \langle \Psi_T | \varphi_k^{(S)} \varphi_l^{(E)} \rangle \langle \varphi_k^{(S)} |, \quad (1.9)$$

où $\{|\varphi_k^{(S)}\rangle\}$ et $\{|\varphi_l^{(E)}\rangle\}$ sont respectivement des bases orthonormées des espaces $\mathcal{H}^{(S)}$ et $\mathcal{H}^{(E)}$.

En fait, on peut toujours considérer le système total T dans un état pur, et ce n'est pas à proprement parler une hypothèse. En effet, supposons que le système T ne soit pas pur, il est représenté par son opérateur densité $\rho^{(T)}$, et l'opérateur densité du système S s'en déduit par la trace partielle sur E (1.8). Puisque la dimension de l'environnement E est supérieure à celle du système S , d'après le théorème de Gisin-Hughston-Josza-Wootters (GHJW) [66, 63], il existe un ensemble $\{|\varphi_n^{(E)}\rangle\}$ de N états purs orthonormés de E permettant de définir un état pur de T

$$|\Psi_T\rangle = \sum_n \sqrt{p_n} |\Psi_n\rangle \otimes |\varphi_n^{(E)}\rangle \quad (1.10)$$

d'où l'on peut déduire :

$$\rho^{(S)} = \text{Tr}_E[|\Psi_T\rangle \langle \Psi_T|]. \quad (1.11)$$

On dit que l'on a *purifié* le système total T . Ainsi, tant que les dimensions de l'environnement E sont suffisamment grandes, il est toujours possible de définir l'opérateur densité du système S comme la trace partielle sur E d'un état pur de T .

1.3 Dynamique Markovienne des Systèmes Ouverts

L'objectif de cette section est d'établir l'évolution dynamique d'un système ouvert par une équation différentielle généralisant l'équation de Schrödinger.

Dans une première partie, on rappelle la représentation de Kraus des opérations quantiques [50]. Puis, en considérant le cas des systèmes Markoviens, on établit dans une seconde partie l'équation pilote de Lindblad. Enfin, dans une troisième et dernière partie, on confronte l'équation de Lindblad avec la théorie phénoménologique de la relaxation.

1.3.1 Théorie des Opérations Quantiques

Dans cette section, on s'intéresse aux transformations que peut subir un système quantique. Une telle transformation doit associer un opérateur densité à un autre opérateur densité, et pour ce faire, elle doit nécessairement préserver les propriétés caractéristiques définies dans la partie 1.2.1.

Soit $\mathcal{D}(\mathcal{H})$ l'ensemble des opérateurs densité agissant sur \mathcal{H} . On appelle *opération quantique* [64], ou encore *super opérateur* [65], tout opérateur linéaire

$$M : \begin{cases} \mathcal{D}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{D}(\mathcal{H}) \\ \rho \mapsto M[\rho] \end{cases} \quad (1.12)$$

conservant l'hermiticité, la trace, et complètement positif.

La propriété de *complète positivité* [61, 62, 67], plus forte que la propriété de positivité, est requise lorsque l'on considère des systèmes ouverts bipartites. En effet, si S et E sont les deux parties constituant le système T , et M un opérateur agissant sur $\mathcal{D}(\mathcal{H}^{(S)})$, alors il faut nécessairement que $M \otimes \mathcal{I}_E$, qui est un opérateur agissant sur $\mathcal{D}(\mathcal{H}^{(T)})$, soit positif. Lorsque $M \otimes \mathcal{I}_E$ est positif pour tout choix d'environnement E , alors l'opérateur M est dit complètement positif. Par ailleurs, on montre que si M est complètement positif, alors M est positif.

Selon le résultat obtenu par Kraus [50], toute opération quantique se décompose comme :

$$M[\rho] = \sum_{k=1}^{N^2} E_k \rho E_k^\dagger \quad (1.13)$$

où les E_k , appelés *opérateurs de Kraus* vérifient la relation de fermeture

$$\sum_{k=1}^{N^2} E_k^\dagger E_k = \mathcal{I}. \quad (1.14)$$

Exemple 1 : Evolution Unitaire.

Un système fermé évolue sous l'action d'une transformation U unitaire :

$$\rho \mapsto M[\rho] = U \rho U^\dagger, \quad (1.15)$$

où :

$$U^\dagger U = \mathcal{I}. \quad (1.16)$$

L'opérateur de Kraus est ici l'opérateur d'évolution généré par l'Hamiltonien du système.

Exemple 2 : Mesure projective de von Neumann.

A l'issue d'une mesure de l'observable

$$\mathcal{Q} = \sum_k q_k |\Phi_k\rangle\langle\Phi_k|, \quad (1.17)$$

où l'on obtient la valeur q_k , le système initialement dans l'état ρ est projeté, sous l'action de l'opérateur $P_k = |\Phi_k\rangle\langle\Phi_k|$, dans l'état $\frac{P_k \rho P_k}{p_k}$ avec la probabilité $p_k = \text{Tr}(\rho P_k)$. Le processus complet est donc décrit par :

$$M[\rho] = \sum_k P_k \rho P_k \quad (1.18)$$

où :

$$\sum_k P_k = \mathcal{I}. \quad (1.19)$$

Les opérateurs de Kraus sont ici les opérateurs de projection sur les sous-espaces propres associés à la mesure.

1.3.2 Equation Pilote de Lindblad

On présente ici un procédé standard permettant d'obtenir l'équation pilote de Lindblad [51, 52], qui décrit la dynamique dissipative des systèmes ouverts dans l'approximation de Born-Markov (c'est-à-dire des systèmes faiblement couplés avec leur environnement ne présentant pas d'effets de mémoire).

Pour ce faire, on dispose d'une double approche. La première, dite *Hamiltonienne* [45], repose sur le concept de dynamique réduite. L'Hamiltonien du système $T = \{S, E\}$ s'écrit comme :

$$H_T = H_S \otimes \mathcal{I}_E + \mathcal{I}_S \otimes H_E + \varepsilon H_I \quad (1.20)$$

où H_S , H_E et H_I sont respectivement les Hamiltoniens des systèmes S , E , et de l'interaction système-environnement, et où ε est un réel représentant l'intensité du couplage.

Puisque le système T est fermé, et représenté par un état pur $|\Psi_T\rangle$ (voir partie 1.2.3), sa dynamique est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i|\dot{\Psi}_T\rangle = H_T|\Psi_T\rangle, \quad (1.21)$$

qui est équivalente, en terme d'opérateur densité, à l'équation de Liouville-von Neumann :

$$\dot{\rho}^{(T)} = -i[H_T, \rho^{(T)}]. \quad (1.22)$$

En supposant que l'état initial de T est séparable ⁵, on effectue la trace partielle sur l'environnement permettant de définir l'état du système S (1.11), pour en déduire l'équation intégral-différentielle suivante [68] :

$$\dot{\rho}^{(S)} = -i[\tilde{H}_S, \rho^{(S)}] + \int_0^t K(t-s)\rho^{(S)}(s)ds \quad (1.23)$$

où $\tilde{H}_S = H_S + \text{Tr}_E[H_I\rho^{(E)}]$ est l'Hamiltonien du système S contenant des termes correctifs décrivant les déplacements des niveaux de S induits par le couplage avec E (Lamb-shift), et où K est le noyau d'un opérateur intégral de convolution contenant la mémoire de $\rho^{(S)}$.

Cette dernière équation, n'est pas très facile à utiliser en pratique, c'est pour cela qu'on effectue une deuxième approche, dite *Markovienne* [46].

Pour cela, on est amené à considérer deux échelles de temps : τ_S , le temps caractéristique d'évolution du système ouvert S , et τ_E , le temps typique mis par l'environnement pour oublier les effets d'interaction avec le système. On effectue à présent deux hypothèses simplificatrices :

- hypothèse de Born : le couplage entre le système ouvert et son environnement est faible : $\varepsilon \rightarrow 0$,

- hypothèse de Markov : toute la mémoire du système est contenue dans l'instant présent : $\tau_E \rightarrow 0$.

Puis, on se place à une échelle de temps τ suffisamment petite devant τ_S pour considérer l'évolution du système S comme infinitésimale ; et suffisamment grande devant τ_E pour considérer l'état de E comme stationnaire. Alors l'évolution du système S entre les instants t et $t + \tau$ s'évalue par :

$$\rho^{(S)}(t + \tau) = M_\tau[\rho^{(S)}(t)], \quad (1.24)$$

⁵c'est une hypothèse purement simplificatrice : si l'état initial de T est intriqué, alors il faut ajouter un terme d'inhomogénéité à cette équation pour décrire les corrélations initiales

où M_τ est une opération quantique décrivant une évolution infinitésimale.

En comparant l'expression (1.24) avec le développement limité à l'ordre 1 suivant :

$$\rho^{(S)}(t + \tau) = \rho^{(S)}(t) + \tau \frac{d}{dt} \rho^{(S)}(t) + O(\tau), \quad (1.25)$$

on obtient :

$$\tau \frac{d}{dt} \rho^{(S)}(t) = M_\tau[\rho^{(S)}(t)] - \rho^{(S)}(t) + O(\tau). \quad (1.26)$$

Or, d'après le résultat (1.13), l'opérateur M_τ admet la décomposition :

$$M_\tau[\rho^{(S)}(t)] = \sum_{k=1}^{N^2} E_k(\tau) \rho^{(S)}(t) E_k^\dagger(\tau). \quad (1.27)$$

Si l'on décompose l'un des opérateurs, E_1 par exemple, comme :

$$E_1(\tau) = \mathcal{I}_S - i\tau A \quad (1.28)$$

où A est un opérateur quelconque que l'on décompose en deux parties hermitienne et anti-hermitienne selon :

$$A = H - iJ \quad \text{avec} \quad H = \frac{A + A^\dagger}{2} \quad \text{et} \quad J = i \frac{A - A^\dagger}{2}, \quad (1.29)$$

où H et J sont deux opérateurs hermitiens.

Par un calcul direct, on obtient :

$$E_1(\tau) \rho^{(S)}(t) E_1^\dagger(\tau) = \rho^{(S)}(t) - i\tau [H, \rho^{(S)}(t)] - \tau (J \rho^{(S)}(t) + \rho^{(S)}(t) J) \quad (1.30)$$

et :

$$E_1^\dagger(\tau) E_1(\tau) = \mathcal{I}_S - 2 \tau J. \quad (1.31)$$

Pour $k > 1$, l'action de chaque opérateur E_k est donnée par :

$$E_k(\tau) \rho^{(S)}(t) E_k^\dagger(\tau) = \tau V_k \rho^{(S)}(t) V_k^\dagger, \quad (1.32)$$

et compte tenu de la relation de fermeture (1.14) et de (1.31), on a :

$$J = \frac{1}{2} \sum_{k>1} V_k^\dagger V_k. \quad (1.33)$$

Pour conclure, en reportant les expressions (1.30), (1.32) et (1.33) dans la relation (1.26), on obtient l'équation pilote de Lindblad :

$$\dot{\rho}^{(S)} = -i[H, \rho^{(S)}] - \sum_{k=1}^{N^2-1} \left(V_k \rho^{(S)} V_k^\dagger - \frac{1}{2} V_k^\dagger V_k \rho^{(S)} - \frac{1}{2} \rho^{(S)} V_k^\dagger V_k \right) \quad (1.34)$$

Remarque 1 : En rapprochant équations (1.23) et (1.34), obtenues respectivement par les approches Hamiltonienne et Markovienne, on peut établir que l'opérateur $H \equiv \tilde{H}_S$, et que sous les conditions de Born-Markov :

$$\int_0^t K(t-s) \rho^{(S)}(s) ds \simeq \sum_{k=1}^{N^2-1} \left(V_k \rho^{(S)} V_k^\dagger - \frac{1}{2} V_k^\dagger V_k \rho^{(S)} - \frac{1}{2} \rho^{(S)} V_k^\dagger V_k \right). \quad (1.35)$$

Cet opérateur, noté $D[\rho^{(S)}]$, contenant toute la partie dissipative de la dynamique du système ouvert, est appelé *opérateur de dissipation*.

Remarque 2 : Lorsque l'opérateur de dissipation est identiquement nul, alors l'équation de Lindblad se réduit à l'équation de Liouville-von Neumann (1.22) des systèmes fermés.

Remarque 3 : La définition de la famille d'opérateurs $\{V_k\}$, n'est pas unique : on peut en effet montrer que l'action d'une transformation unitaire sur ces opérateurs laisse l'équation de Lindblad invariante.

Remarque 4 : L'équation pilote de Lindblad

$$\dot{\rho} = L\rho \quad \text{où} \quad L = -i[H, \rho] + D[\rho] \quad (1.36)$$

est une équation différentielle linéaire, caractérisée par une famille d'applications, indexée par le temps $t \geq 0$ et générée par L , appelé *Lindbladien* : $g^t = \{\exp(tL)\}$. Cette famille d'applications sur $\mathcal{D}(\mathcal{H})$, qui par définition est complètement positive, conserve la trace, et vérifie la propriété de semigroupe :

$$g^{t+s} = g^t g^s \quad \forall t, s \in \mathbb{R}_+ \quad (1.37)$$

est appelée *semigroupe dynamique quantique* [59, 60].

1.3.3 Théorie Phénoménologique de la Relaxation

Dans cette section, on rappelle l'évolution des systèmes ouverts telle qu'elle est décrite dans la *théorie de la relaxation*.

D'un point de vue qualitatif, la théorie de la relaxation décrit des dynamiques qui, asymptotiquement, tendent de manière irréversible vers un point fixe. Cette modélisation, reposant sur des observations empiriques, introduit le concept de *taux de relaxation*, qui est une quantité de dimension inversement proportionnelle au temps relatant la vitesse à laquelle le processus de relaxation s'effectue. Au travers de la comparaison entre l'équation de Lindblad précédemment établie, qui décrit l'évolution la plus générale des systèmes Markoviens, et la théorie phénoménologique de la relaxation, on va pouvoir d'une part, conforter le modèle dynamique de la théorie de la relaxation, et d'autre part, donner un sens physique aux différents termes apparaissant dans le Lindbladien.

La théorie de la relaxation décrit une évolution composée de deux types de phénomènes :

- la *relaxation de populations*, portant sur les populations de la matrice densité :

$$\dot{\rho}_{kk} = -i[H, \rho]_{kk} + \sum_{l \neq k}^N (\gamma_{lk} \rho_{ll} - \gamma_{kl} \rho_{kk}), \quad (1.38)$$

où les coefficients positifs γ_{kl} traduisent une redistribution des populations,
- les *relaxations de phases*, portant sur les cohérences de la matrice densité :

$$\dot{\rho}_{kl} = -i[H, \rho]_{kl} - \Gamma_{kl} \rho_{kl}, \quad (1.39)$$

où les coefficients positifs Γ_{kl} reflètent une destruction des cohérences.

D'une manière générale, les taux de relaxations Γ_{kl} et γ_{kl} sont choisis positifs. Mais ce n'est pas assez restrictif. En effet, certains choix particuliers de coefficients conduisent à des dynamiques qui ne respectent pas l'équation de Lindblad. Il convient donc de comparer les équations phénoménologiques (1.38) et (1.39) à l'équation de Lindblad.

1.4 Cas du Système à 2 Niveaux

Dans cette section, on étudie le modèle simple du système dissipatif à 2 niveaux, qui est assez riche pour illustrer la totalité des concepts évoqués dans les sections précédentes. Cette section est découpée en deux parties. Dans la première partie, on montre que tout état du système à 2 niveaux est représenté par un vecteur de \mathbb{R}^3 confiné dans une boule de rayon 1. Dans la

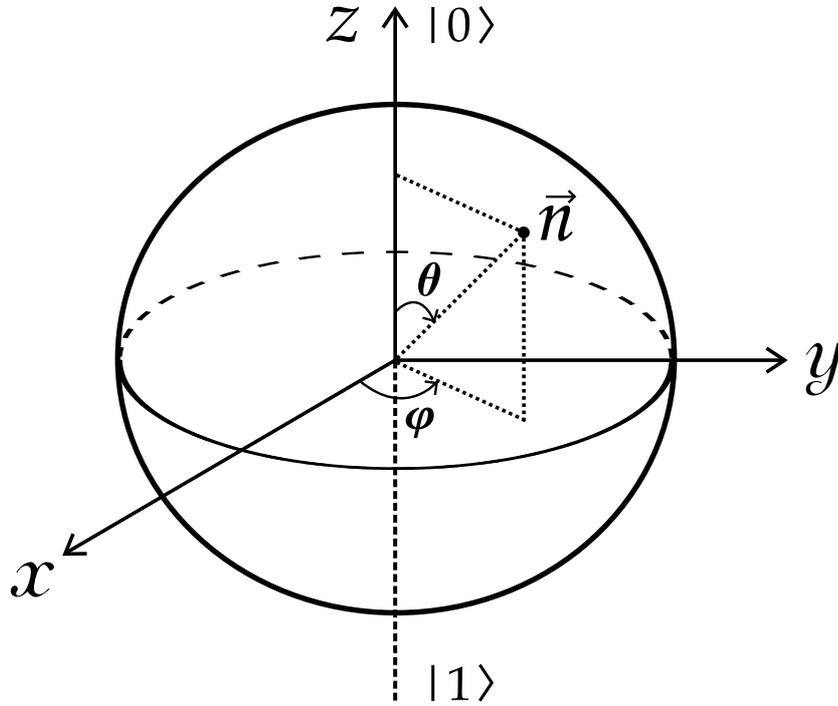


FIG. 1.2 – Boule de Bloch : l'état ρ d'un système à 2 niveaux est représenté par un vecteur réel \vec{n} appartenant à une boule de rayon unité.

seconde partie, on étudie l'équation de Lindblad en adoptant le point de vue de la théorie de la relaxation. Tous les résultats obtenus sont généralisables en dimension N finie.

1.4.1 Représentation : Vecteur de Bloch

Dans le cas du système à 2 niveaux, appelé *qubit* en information quantique, la forme générale de la représentation matricielle de l'opérateur densité, compte tenu de ses trois propriétés caractéristiques, est

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x-iy \\ x+iy & 1-z \end{pmatrix} \quad (1.40)$$

où x , y et z sont trois réels vérifiant

$$\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq 1 \quad (1.41)$$

pour assurer la positivité.

En utilisant les matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.42)$$

et l'identité \mathcal{I}_2 , l'opérateur densité (1.40) s'écrit sous la forme :

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathcal{I}_2 + \vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \quad (1.43)$$

où $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ et $\vec{n} = (x, y, z)$ est un vecteur de \mathbb{R}^3 , appelé *vecteur de Bloch* [69], qui caractérise complètement le système.

L'inégalité (1.4.1), équivalente à $|\vec{n}| \leq 1$, signifie que l'extrémité du vecteur de Bloch appartient nécessairement à une boule de rayon 1 appelé *boule de Bloch* (figure 1.2).

Dans cette représentation, l'extrémité du vecteur de Bloch appartient à la surface de la boule de Bloch ($|\vec{n}| = 1$) si et seulement si le système à 2 niveaux est dans un état pur $|\Psi\rangle$; alors cet état pur est donné par :

$$|\Psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} |1\rangle, \quad (1.44)$$

où l'on convient que les vecteurs de bases $|0\rangle$ et $|1\rangle$ sont respectivement représentés par les pôles nord et sud de la boule de Bloch, et où les angles $\theta \in [0, \pi]$ et $\varphi \in [0, 2\pi[$ sont les angles des coordonnées sphériques habituelles :

$$\begin{cases} x = \sin \theta \cos \varphi \\ y = \sin \theta \sin \varphi \\ z = \cos \theta \end{cases} . \quad (1.45)$$

1.4.2 Evolution : Forme de Redfield

Pour les système à 2 niveaux évoluant librement, l'équation pilote de Lindblad est caractérisée par :

- l'Hamiltonien H , écrit dans sa base propre $\{|0\rangle, |1\rangle\}$:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}; \quad (1.46)$$

- un ensemble de $2^2 - 1 = 3$ opérateurs de Lindblad $\{V_k\}$ vérifiant la relation de fermeture (1.14) et correspondant à des sauts quantiques :

$$V_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.47)$$

décrit le transfert de population $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$, accompagné d'une émission d'énergie;

$$V_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.48)$$

décrit le transfert de population $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$, accompagné d'une absorption d'énergie ;

$$V_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.49)$$

décrit un déphasage pur, qui ne s'accompagne d'aucun échange d'énergie entre le système et son environnement.

En pondérant arbitrairement chaque opérateur V_k par un réel positif v_k , l'équation de Lindblad (1.34) se décompose sous la forme vectorielle suivante, dite *forme de Redfield* :

$$\begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11} \\ \dot{\rho}_{12} \\ \dot{\rho}_{21} \\ \dot{\rho}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -v_2^2 & 0 & 0 & v_1^2 \\ 0 & i\omega - 2v_3^2 - \frac{v_1^2+v_2^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\omega - 2v_3^2 - \frac{v_1^2+v_2^2}{2} & 0 \\ v_2^2 & 0 & 0 & -v_1^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} \\ \rho_{12} \\ \rho_{21} \\ \rho_{22} \end{pmatrix}$$

où $\omega = E_2 - E_1$.

Le modèle phénoménologique de la relaxation (1.38) et (1.39) donne un modèle comparable, en terme de taux de relaxation :

$$\begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11} \\ \dot{\rho}_{12} \\ \dot{\rho}_{21} \\ \dot{\rho}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\gamma_{12} & 0 & 0 & \gamma_{21} \\ 0 & i\omega - \Gamma_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\omega - \Gamma_{21} & 0 \\ \gamma_{12} & 0 & 0 & -\gamma_{21} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} \\ \rho_{12} \\ \rho_{21} \\ \rho_{22} \end{pmatrix}. \quad (1.50)$$

On obtient ainsi les relations suivantes :

$$\begin{cases} \gamma_{12} = v_1^2 \\ \gamma_{21} = v_2^2 \\ \Gamma_{12} = \Gamma_{21} = 2v_3^2 + \frac{v_1^2+v_2^2}{2} \end{cases} \quad (1.51)$$

et en posant, $\Gamma = \Gamma_{12} = \Gamma_{21}$, on conclut que la dynamique est acceptable si et seulement si :

$$\Gamma \geq \frac{\gamma_{12} + \gamma_{21}}{2}. \quad (1.52)$$

La figure 1.3 montre un exemple de dynamique dissipative selon l'équation de Lindblad, où l'on fait apparaître les relaxations des populations et des cohérences.

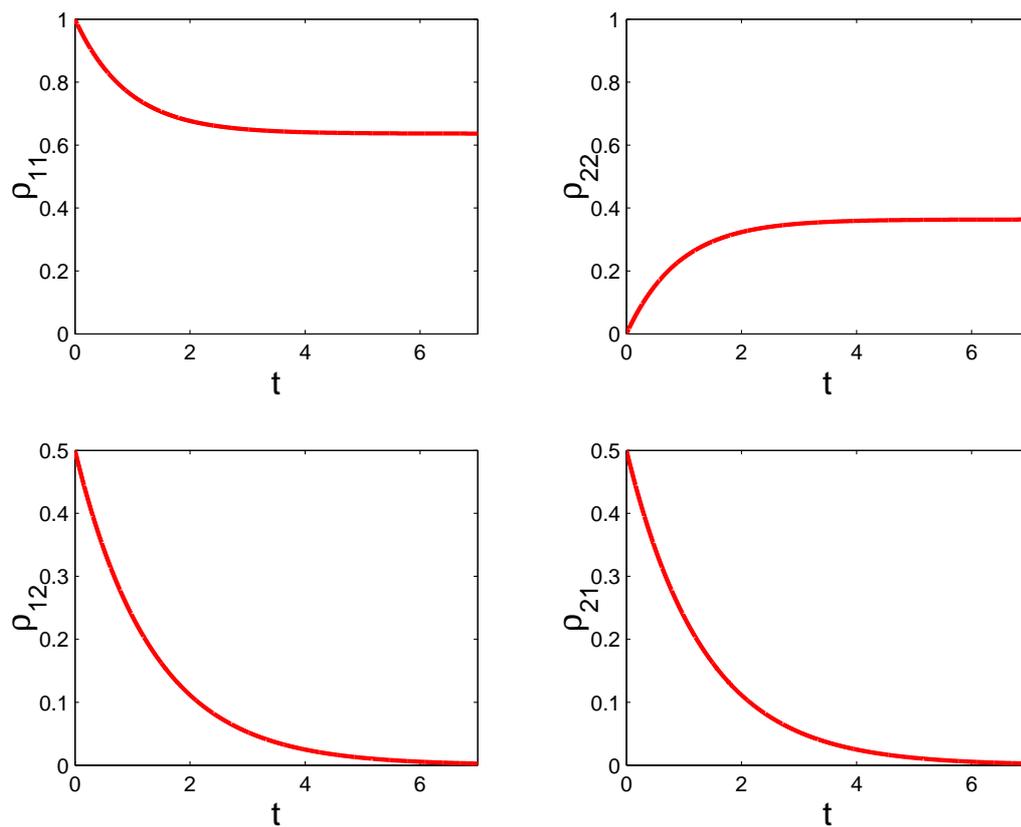


FIG. 1.3 – Relaxations des populations et des cohérences décrites par l'équation de Lindblad : en partant d'un état initial $(\rho_{11}, \rho_{12}, \rho_{21}, \rho_{22}) = (1, 0.5, 0.5, 0)$, on observe la destruction des cohérences et une redistribution des populations vers un point fixe (les paramètres numériques sont : $\gamma_{12} = 0.4$, $\gamma_{21} = 0.7$ et $\Gamma = 0.75$).

Chapitre 2

Alignement Moléculaire en Milieu Dissipatif

L'orientation et l'alignement des molécules linéaires sont, dans le domaine du contrôle de la dynamique quantique, des domaines de recherche actifs tant du point de vue théorique qu'expérimental, possédant différentes applications pratiques en physique, en chimie et potentiellement en biologie [80, 81], parmi lesquelles on trouve :

- la séparation isotopique [70] et la catalyse [71] assistées par laser,
- la compression d'impulsion [72] et la conception de structures nanométriques [73, 74],
- l'imagerie tomographique des molécules [75] et le traitement de l'information quantique [76].

Dans ce premier chapitre dédié au contrôle quantique, on propose la modélisation théorique suivie de la simulation numérique d'un processus d'alignement d'une molécule diatomique par un train d'impulsions laser ultra-courtes en milieu dissipatif.

Ce chapitre comprend trois sections. La première section débute par quelques rappels sur l'Hamiltonien d'interaction matière-rayonnement, ou Hamiltonien contrôlé, mis en jeu dans les processus que l'on décrit tout au long de ce rapport de thèse. Il s'agit d'un Hamiltonien décrivant l'interaction d'un système à N niveaux couplés, par le biais de son opérateur moment dipolaire, à un laser monochromatique polarisé linéairement. On précise ensuite la forme de l'Hamiltonien d'interaction spécifiquement utilisé dans ce chapitre, qui sert à décrire le processus d'orientation et d'alignement d'une molécule linéaire. Dans la seconde section, on présente la stratégie mise en oeuvre pour effectuer l'alignement en milieu dissipatif. La principale source de complexité est que l'état cible, défini comme l'état qui maximise une certaine observable,

dépend du temps. Pour essayer de contourner cette difficulté, on envoie sur le système un train d'impulsions très rapides par rapport à son temps caractéristique d'évolution, ce qui permet d'estimer que la cible reste à peu près la même pendant la durée du contrôle. Enfin, dans la dernière section, on présente les résultats numériques obtenus, qui sont analysés et comparés avec d'autres simulations numériques s'appuyant sur un algorithme génétique.

Les sections 2 et 3 correspondent à l'article [2].

2.1 Modélisation et Enoncé du Problème

Cette première section s'articule en deux parties. La première, assez générale, présente les éléments fondamentaux de la théorie semi-classique de l'interaction matière-rayonnement, en se plaçant dans le contexte simple où le champ électromagnétique se propage sous la forme d'une onde plane monochromatique (voir figure 2.1). L'Hamiltonien obtenu se généralise facilement pour des situations physiques plus complexes telles que celle présentée en seconde partie où une molécule diatomique, modélisée par un rotateur rigide, interagit avec un laser intense.

2.1.1 Interaction Matière-Rayonnement

On commence par étudier la dynamique d'une charge liée à un atome ou à une molécule par un potentiel V , et soumise au rayonnement du champ électromagnétique classique (\mathbf{E}, \mathbf{B}) dérivant des potentiels (\mathbf{A}, U) .

L'Hamiltonien de cette charge, caractérisé par sa position \mathbf{R} , son impulsion \mathbf{P} , sa masse m , sa charge q est donné par [?] :

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2 + qU + V(\mathbf{R}), \quad (2.1)$$

Une fois développé, cet Hamiltonien (2.1) peut se mettre sous la forme :

$$H = H_0 + H_1 \quad (2.2)$$

où

$$H_0 = \frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 + V(\mathbf{R}) \quad (2.3)$$

est l'Hamiltonien de la charge en l'absence de champ électromagnétique, et

$$H_1 = -\frac{q}{m}\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} + qU + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2 \quad (2.4)$$

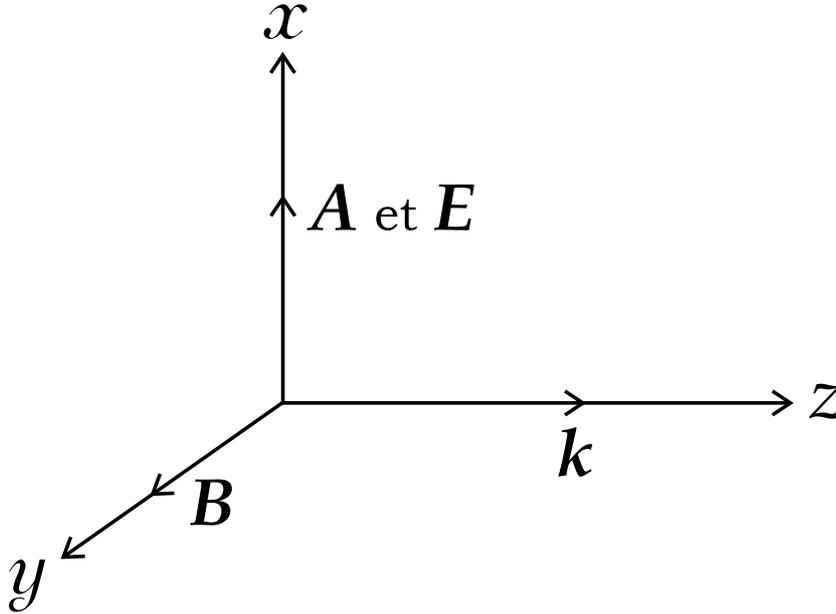


FIG. 2.1 – Configuration spatiale du champ électromagnétique.

est l'Hamiltonien d'interaction entre le champ électromagnétique et l'électron.

On effectue à présent deux hypothèses sur le champ électromagnétique permettant d'obtenir la forme simple de l'Hamiltonien d'interaction.

D'abord, on se place dans le *régime perturbatif*, autrement dit on considère une intensité de rayonnement suffisamment faible pour pouvoir négliger le terme $\frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2$ (quadratique en A_0) devant le terme $\frac{q}{m}\mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$ (linéaire en A_0). Ensuite, on effectue l'*approximation dipolaire*, c'est-à-dire qu'on suppose la longueur d'onde du rayonnement $\lambda = \frac{2\pi}{\omega}$ très grande devant les dimensions caractéristiques de la charge ou plus généralement du système quantique considéré (de l'ordre de l'Angstrom), de sorte que l'on peut négliger la variation spatiale du champ ($\exp(ikz) \simeq 1$).

Sous ces hypothèses, le potentiel vecteur \mathbf{A} et le champ électrique dérivant \mathbf{E} , prennent des formes particulièrement simples :

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= A_0 \sin(\omega t) \mathbf{e}_x & \text{avec} & & E_0 &= -\omega A_0. \\ \mathbf{E} &= E_0 \cos(\omega t) \mathbf{e}_x \end{aligned} \quad (2.5)$$

Ainsi, l'expression de l'Hamiltonien d'interaction (2.4) dans la jauge de Coulomb où $U = 0$ est :

$$H_1 = -\frac{q}{m} p_x A_x - qU = -\frac{qA_0}{m} p_x \sin(\omega t). \quad (2.6)$$

Pour terminer et obtenir une expression de cet Hamiltonien qui ne fait plus intervenir le potentiel vecteur, on effectue un changement de jauge ([77, 78]) avec la fonction de jauge (voir [83], complément AXIII) :

$$G = -A_0 x \sin(\omega t) \quad (2.7)$$

qui donne :

$$\begin{cases} \mathbf{A}' = 0 \\ U' = -E_0 x \cos(\omega t) \end{cases} \quad (2.8)$$

Alors l'Hamiltonien d'interaction dans cette nouvelle jauge est :

$$H_1 = -\frac{q}{m} p_x A'_x - qU' = -qx E_0 \cos(\omega t). \quad (2.9)$$

En identifiant $\mu_x = qx$ comme la composante selon x de l'opérateur *moment dipolaire* $\boldsymbol{\mu}$, on obtient la forme standard de l'Hamiltonien d'interaction matière-rayonnement :

$$H_1 = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}. \quad (2.10)$$

Cet Hamiltonien est *semi-classique* : la matière est traitée quantiquement, tandis que le champ électrique qui l'entoure, traité classiquement, est une superposition d'ondes planes monochromatiques.

On termine cette section sur quelques remarques permettant la généralisation de cet Hamiltonien.

Remarque 1 : on a étudié l'effet du champ sur une charge unique q du système quantique que l'on souhaite contrôler, mais en réalité ce dernier en possède un grand nombre n_e répartis dans les positions \mathbf{r}_j , il faut alors remplacer le terme qx par un moment dipolaire plus général : $\sum_{j=1}^{n_e} q_j \mathbf{r}_j$.

Remarque 2 : le milieu bien spécifique de propagation et la faible intensité du champ électrique ont permis d'aboutir à un moment dipolaire linéaire. D'une façon plus générale, le milieu permet à la matière d'exhiber des effets non linéaires d'autant plus visibles que l'intensité du champ est élevée : $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}(\mathbf{E})$.

Remarque 3 : dans l'approximation de l'enveloppe lentement variable, on modélise le champ électrique par une onde porteuse de fréquence ω modulée par une enveloppe $\mathcal{E}(t)$ polarisée linéairement dans la direction \mathbf{e} , autrement dit : $\mathbf{E} = \mathcal{E}(t) \cos(\omega t) \mathbf{e}$

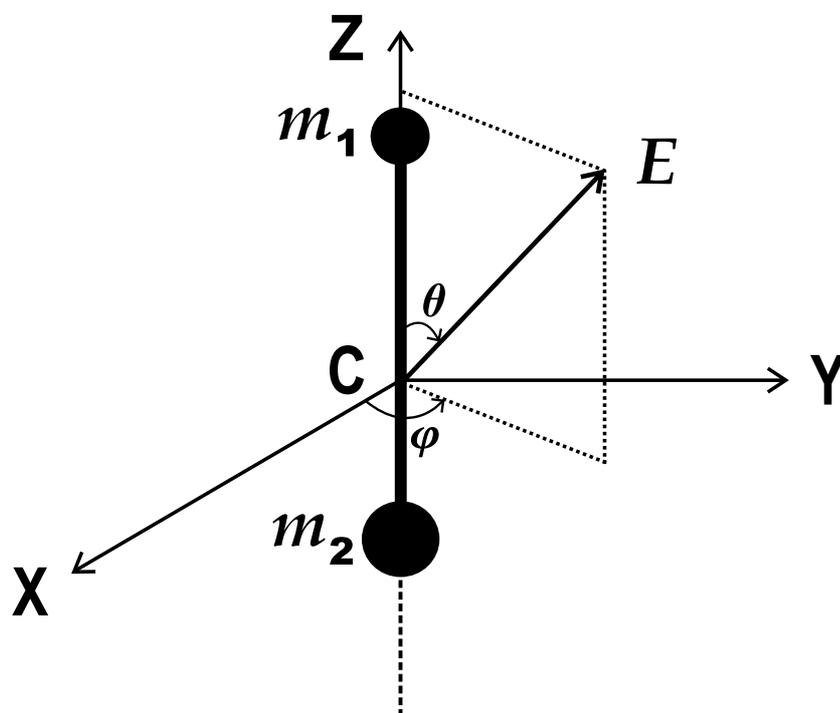


FIG. 2.2 – Définition des angles sphériques θ et φ pour l'orientation et l'alignement dans un repère $\{X, Y, Z\}$ lié à la molécule.

2.1.2 Alignement d'une Molécule Diatomique

Dans cette seconde partie, on présente la modélisation du processus d'alignement d'une molécule diatomique¹ en milieu dissipatif, par contrôle de ses modes de rotation. La dynamique rotationnelle, décrite par le modèle simple du rotateur rigide, est contrôlée par un champ électrique intense et polarisé linéairement, tandis que la dissipation est obtenue à l'aide d'une loi semi-empirique.

En physique moléculaire, on constate qu'en général – et c'est le cas pour la molécule CO à laquelle on s'intéresse – l'énergie de rotation est bien plus faible que les énergies électroniques et de vibrations. Par conséquent, on effectue l'approximation de Born-Oppenheimer de séparation du mouvement des noyaux et des électrons; et l'on peut supposer que la molécule ne vibre pas lors de l'étude de son mouvement de rotation, ce que l'on traduit par une distance interatomique fixe. Dans ce contexte, la molécule diatomique est décrite par le modèle simple du *rotateur rigide*.

¹ou plus généralement linéaire

On considère donc un système de deux atomes, de masse réduite m , et séparés par la distance d supposée fixe. Leur centre de masse C , est choisi comme l'origine d'un repère $\{X, Y, Z\}$ lié à la molécule, où Z est la direction définie par les deux atomes (figure 2.2).

L'Hamiltonien d'un tel système est donné par :

$$H_0 = B\mathbf{J}^2 \quad \text{avec} \quad B = \frac{1}{2md^2}, \quad (2.11)$$

où \mathbf{J} est l'opérateur *moment angulaire* de la molécule, et B sa *constante de rotation*.

Conformément à la théorie du moment cinétique [82], l'équation de Schrödinger stationnaire

$$B\mathbf{J}^2|jm\rangle = E_j|jm\rangle \quad (2.12)$$

admet pour valeurs propres les énergies $E_j = Bj(j+1)$, et pour vecteurs propres les harmoniques sphériques $Y_m^j(\theta, \varphi) = \langle \theta\varphi|jm\rangle$, où $j \in \mathbb{N}$ et $-j \leq m \leq j$.

Lorsqu'on place cette molécule diatomique dans un rayonnement laser modélisé par une onde plane monochromatique $\mathbf{E}(t) = \mathcal{E}(t) \cos(\omega t)\mathbf{e}$, son Hamiltonien libre H_0 est perturbé par un Hamiltonien d'interaction H_1 :

$$H_1(t) = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{E}(t), \quad (2.13)$$

où pour un champ suffisamment intense pour sortir du régime perturbatif et envisager des effets non linéaires, l'opérateur moment dipolaire est un développement tensoriel d'ordre 2 [86, 87] :

$$\boldsymbol{\mu}(\mathbf{E}) = \boldsymbol{\mu}_0 + \frac{1}{2}\bar{\alpha}\mathbf{E} \quad (2.14)$$

où $\boldsymbol{\mu}_0$ et $\bar{\alpha}$ sont respectivement le *moment dipolaire permanent* et le *tenseur de polarisabilité*.

Le moment dipolaire permanent est la polarisation due à la non coïncidence des barycentres des charges négatives et positives, entraînée par la différence d'électronégativité des atomes C et O.

Une polarisation temporaire peut être induite par l'action du champ électrique extérieur, et la polarisabilité représente la facilité avec laquelle un nuage électronique se déforme sous l'action de ce champ.

Dans le repère $\{X, Y, Z\}$ lié à la molécule, on a

$$\boldsymbol{\mu}_0 = \mu_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{E} = \mathcal{E}(t) \cos(\omega t) \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

et les seules composantes non nulles du tenseur de polarisabilité sont :

$$\alpha_{XX} = \alpha_{YY} = \alpha_{\perp} \quad \text{et} \quad \alpha_{ZZ} = \alpha_{\parallel}. \quad (2.16)$$

Ainsi, dans ce repère, l'Hamiltonien d'interaction s'écrit

$$H_1 = -\mu_0 \cos \theta \mathcal{E}(t) \cos(\omega t) - \frac{1}{2} (\alpha_{\perp} + \Delta\alpha \cos^2 \theta) \mathcal{E}^2(t) \cos^2(\omega t), \quad (2.17)$$

où $\Delta\alpha = \alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}$.

En l'absence de sources de dissipation, la dynamique d'un tel système est périodique de *période rotationnelle*

$$T_B = \frac{\pi}{B}, \quad (2.18)$$

qui définit le temps typique d'évolution du système.

On considère que la période $T = \frac{2\pi}{\omega}$ de la porteuse de l'impulsion laser est très courte devant la période rotationnelle T_B de la molécule. Dans ces conditions, on peut considérer que la molécule voit un effet moyen des variations de la porteuse. Autrement dit, puisque la valeur moyenne de $\cos(\omega t)$ est nulle, et que celle de $\cos^2(\omega t)$ vaut $\frac{1}{2}$, on a l'Hamiltonien d'interaction moyenné :

$$H_1 = -\frac{1}{4} \mathcal{E}^2(t) (\alpha_{\perp} + \Delta\alpha \cos^2 \theta). \quad (2.19)$$

Dans cet Hamiltonien H_1 , on peut négliger, en s'appuyant sur des constatations numériques, l'effet du terme $-\frac{1}{4} \mathcal{E}^2(t) \alpha_{\perp}$, ce qui simplifie l'expression de l'Hamiltonien en :

$$H_1 = -\frac{1}{4} \mathcal{E}^2(t) \Delta\alpha \cos^2 \theta. \quad (2.20)$$

Lorsque la molécule évolue en milieu gazeux dissipatif, ses états sont représentés par l'opérateur densité ρ agissant sur l'espace des états engendré par la base des harmoniques sphériques $|jm\rangle$.

Le contrôle de l'alignement obéit alors à l'équation de Lindblad [84, 85] :

$$\dot{\rho} = -i[H_0 + H_1(t), \rho(t)] + D[\rho(t)], \quad (2.21)$$

où D est l'opérateur de dissipation agissant sur l'espace des opérateurs densité.

Cet opérateur modélise la dynamique dissipative engendrée par les collisions du système avec les molécules constituant le gaz environnant. En notant

$\rho_{jmj'm'} = \langle jm|\rho(t)|j'm'\rangle$ les éléments de la matrice densité, l'opérateur de dissipation $D[\rho(t)]$ s'écrit comme :

$$\langle jm|D[\rho(t)]|j'm'\rangle = -\sum_{j''m''} \frac{1}{2}(K_{jmj''m''} + K_{j'm'j''m''})\rho_{jmj'm'} - \delta_{jj'}\delta_{mm'}K_{j''m''jm}\rho_{j''m''j''m''}, \quad (2.22)$$

où $\delta_{jj'}$ est la fonction delta de Kronecker.

Les coefficients $K_{jmj'm'}$ sont déterminés par la loi semi-empirique SPEG (« statistical power-exponential gap ») [88]. D'autres lois, telles que la loi ECS (« energy-correlated sudden ») [89], donnent des résultats similaires.

Pour le modèle de la molécule CO dans un gaz d'Argon auquel on s'intéresse, la forme et l'intensité des taux de transition $K_{jmj'm'}$ dépendent de l'interaction entre la molécule et son environnement, et conformément aux observations expérimentales, on suppose que :

- Les coefficients $K_{jmj'm'}$ satisfont la condition de bilan détaillé,
- les coefficients $K_{jmj'm'}$ sont indépendants de m et de m' ,
- les coefficients $K_{jmj'm'}$ sont très faibles.

Enfin, dans l'expression de D , on ne prend pas en compte les termes de déphasages purs qui sont supposés très petits pour de tels systèmes [84, 85].

2.2 Stratégie de Contrôle

D'un point de vue qualitatif, effectuer l'alignement d'une molécule linéaire signifie augmenter de la manière la plus uniforme possible la distribution de probabilité angulaire autour d'une direction privilégiée de l'espace. Plus précisément, en partant d'un état d'équilibre thermique, on souhaite atteindre l'état cible qui maximise la valeur moyenne de l'observable $\cos^2 \theta$. Dans cette section on détaille la stratégie mise en oeuvre pour effectuer cet alignement en milieu dissipatif. La principale source de complexité est que l'état cible, défini comme l'état qui maximise une certaine observable, dépend du temps. Pour essayer de contourner cette difficulté, on envoie sur le système un train d'impulsions très rapides par rapport à son temps caractéristique d'évolution, ce qui permet d'estimer que la cible reste à peu près la même pendant la durée du contrôle.

2.2.1 Etat Initial d'Equilibre

La condition initiale ρ_0 est la distribution d'équilibre thermique à la température T :

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{j \leq |m|} |j, m\rangle e^{-Bj(j+1)/k_B T} \langle j, m|, \quad (2.23)$$

appelée *état de Gibbs*, où $Z = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{j \leq |m|} e^{-Bj(j+1)/k_B T}$ et k_B sont respectivement la fonction de partition et la constante de Boltzmann.

Pour satisfaire la condition de bilan détaillé, on impose

$$K_{jmj'm'} e^{-Bj(j+1)/k_B T} = K_{j'm'jm} e^{-Bj'(j'+1)/k_B T}. \quad (2.24)$$

Les coefficients SPEG ou ECS sont déterminés de telle sorte qu'ils reproduisent la dynamique de relaxation du système, dont ρ_0 est le point fixe. Autrement dit, en l'absence de tout contrôle, tout état rotationnel de la molécule diatomique tend asymptotiquement (quand $t \rightarrow \infty$) vers cet état de Gibbs.

2.2.2 Etat Cible

L'objectif du contrôle de l'alignement est de conduire le système dans un état ρ_{opt} qui maximise la valeur moyenne de l'opérateur $\cos^2 \theta$. La cible n'est donc pas définie directement, et on propose dans cette partie une caractérisation de l'état cible qui permet de remplir ce critère.

Pour cela, on restreint l'espace de Hilbert \mathcal{H} à un sous-espace de dimension finie $\mathcal{H}^{(j_{max})}$, où j_{max} est l'état de plus haute énergie rotationnelle significativement peuplé [90, 91]. Compte tenu de la dégénérescence des niveaux d'énergie rotationnels [82], la dimension de $\mathcal{H}^{(j_{max})}$ est $N = (j_{max} + 1)^2$.

On définit à présent deux opérateurs sur $\mathcal{H}^{(j_{max})}$: $\rho^{(j_{max})}$ et $V^{(j_{max})}$, qui sont respectivement les projections des opérateurs ρ et $\cos^2 \theta$ sur le sous-espace $\mathcal{H}^{(j_{max})}$.

Soit $t \geq 0$ un instant quelconque, et $\rho^{(j_{max})}(t)$ l'état dynamique instantané du système correspondant ; et soit U_{opt} l'opérateur unitaire qui maximise la quantité $\text{Tr}[U \rho(t)^{(j_{max})} U^\dagger V^{(j_{max})}]$, où $U \in U(N)$.

A l'instant t , $\rho_{opt}(t)$ est alors donné par

$$\rho_{opt}(t) = U_{opt} \rho(t) U_{opt}^\dagger. \quad (2.25)$$

L'état cible $\rho_{opt}(t)$ est donc défini comme l'état unitairement équivalent à $\rho(t)$ qui maximise $\langle \cos^2 \theta \rangle$.

Cependant, attendu que le contrôle ne peut pas éliminer les effets de la dissipation, l'état cible tel qu'il est précédemment défini ne peut être atteint exactement. En effet, la cible ρ_{opt} telle qu'elle est définie en (2.25) est relative à l'état courant $\rho(t)$, et par suite est dynamique : toute variation de l'état courant pour tenter de la rejoindre entraîne une modification de celle-ci. Pour déterminer explicitement $\rho_{opt}(t)$, on note respectivement $\rho_k(t)$ et χ_k , pour ($1 \leq k \leq N$), les valeurs propres non dégénérées des opérateurs $\rho(t)^{(j_{max})}$ et $V^{(j_{max})}$, que l'on indexe par ordre de croissance. Les vecteurs propres de $V^{(j_{max})}$ correspondants sont notés $|\chi_k\rangle$. On peut montrer que l'état cible [90, 91], qui n'est pas unique si le spectre de $\rho(t)$ est dégénéré, est donné par :

$$\rho_{opt}(t) = \sum_{k=1}^N \rho_k(t) |\chi_k\rangle \langle \chi_k|, \quad (2.26)$$

et alors la valeur moyenne correspondante de $V^{(j_{max})}$ est :

$$\text{Tr}[\rho_{opt}(t) V^{(j_{max})}] = \sum_{k=1}^N \rho_k(t) \chi_k. \quad (2.27)$$

Remarque : la définition de l'état cible, qui dépend du temps puisque l'évolution du système est non-unitaire, est intrinsèque et ne tient pas compte de la forme particulière du champ de contrôle appliquée.

Dans le cas d'une polarisation linéaire, la molécule diatomique n'est pas complètement couplée à un champ polarisé linéairement dans le sens où, pour une valeur donnée de m , l'espace de Hilbert $\mathcal{H}^{(j_{max})}$ se décompose comme la somme directe des deux sous-espaces $\mathcal{H}_{m,ev}^{(j_{max})}$ et $\mathcal{H}_{m,odd}^{(j_{max})}$ de parité différente pour j : *ev* pour pair, et *odd* pour impair. Ces deux sous-espaces ne sont pas couplés entre eux par l'opérateur $V^{(j_{max})}$ et on a donc :

$$\mathcal{H}^{(j_{max})} = \bigoplus_{m=-j_{max}}^{m=j_{max}} (\mathcal{H}_{m,ev}^{(j_{max})} \oplus \mathcal{H}_{m,odd}^{(j_{max})}). \quad (2.28)$$

De plus, les équations (2.21) et (2.22) montrent que les coefficients $\rho_{jmj'm'}$ sont nuls si $m \neq m'$, ou si j et j' n'ont pas la même parité.

En s'appuyant sur la précédente décomposition, on peut définir un nouvel état cible $\rho_{lin}^{(j_{max})}$ cinématiquement accessible par opération unitaire et satisfaisant les règles de sélections propres à un laser polarisé linéairement :

$$\rho_{lin}^{(j_{max})} = \bigoplus_{m=-j_{max}}^{m=j_{max}} (\rho_{m,ev}^{(j_{max})} \oplus \rho_{m,odd}^{(j_{max})}), \quad (2.29)$$

où $\rho_{m,ev}^{(j_{max})}$ et $\rho_{m,odd}^{(j_{max})}$ sont définis de la même manière que $\rho_{opt}^{(j_{max})}$ dans leurs sous-espaces respectifs.

En effectuant la réduction en dimension finie de l'espace de Hilbert, on peut donc définir deux cibles : $\rho_{opt}^{(j_{max})}$ et $\rho_{lin}^{(j_{max})}$, qui maximisent respectivement la valeur moyenne de l'opérateur $V^{(j_{max})}$ dans le cas d'une polarisation quelconque ou linéaire.

2.2.3 Approximation Soudaine

Pour un espace de dimension finie, la cible qui maximise la valeur moyenne de l'opérateur $\cos^2 \theta$ est dynamique car elle est définie relativement à l'état instantané du système. C'est un problème majeur lié à la nature dissipative de la dynamique du système qui rend le contrôle a priori très difficile à réaliser. Cependant, on peut envisager d'agir très rapidement sur la molécule de manière à supposer que l'état cible varie très peu pendant la durée du contrôle : on se place donc dans l'*approximation soudaine* [92].

Plus précisément, en appliquant une impulsion laser de durée très courte, appelée *kick*, par rapport au temps caractéristique d'évolution du système, on peut supposer, en première approximation, que le changement d'état de $\rho(t)$ à $\rho_{opt}(t)$ se déroule sur une échelle de temps suffisamment petite pour que l'on puisse considérer que le champ laser ne modifie pas la pureté du système.

D'un point de vue pratique, cette approximation est tout à fait raisonnable et justifiée tant que la durée du contrôle est très courte devant le temps typique de la dissipation, ce qui est précisément vrai pour une stratégie de kicks que l'on va adopter.

Pour résumer, l'état cible $\rho_{opt}(t)$ peut être atteint de manière efficace en partant de $\rho(t)$ pour un champ de contrôle suffisamment rapide.

On évalue la réussite du contrôle selon deux critères :

- l'*efficacité*, qui est mesurée directement par la valeur moyenne de l'observable $\cos^2 \theta$,
- et la *durée* pendant laquelle un alignement efficace est maintenu post-impulsion, avant que l'évolution libre ne le détruise.

Afin d'augmenter l'efficacité du contrôle, on envisage d'envoyer sur le système un *train de kicks*, c'est-à-dire une série de kicks identiques, séparés par des délais temporels à optimiser.

2.3 Résultats et Analyse

On présente dans cette section les simulations numériques où les paramètres du modèle sont ceux d'une molécule CO dans un gaz d'Argon avec les températures rotationnelles $T = 10$ K et $T = 50$ K et une pression de $p = 1$ atm.

Ces simulations sont réalisées avec deux approches distinctes dont on compare les résultats. La première adopte la stratégie dite du maximum, où on applique le kick $k + 1$ au moment où le résultat $\langle \cos^2 \theta \rangle$ de la dynamique post impulsion du kick k passe par un maximum [92, 93]. La seconde repose sur un algorithme génétique [94].

Sur les différentes figures qui suivent, l'unité de l'échelle de temps est rapportée à la période propre rotationnelle T_{per} de la molécule libre de CO. Les kicks sont modélisés par des impulsions Gaussiennes d'amplitude crête Ω_0 et de largeur à mi-hauteur σ . Ces paramètres numériques sont de l'ordre de 500 pour Ω_0/B et de $0.01 \times T_{per}$ pour σ . Ceux-ci correspondent à une pulsation laser dont la durée et l'intensité typiques sont respectivement 50 fs et 10^{14} W/cm².

Pour les deux stratégies envisagées, on étudie l'évolution de deux quantités dynamiques sous l'effet d'un train de kicks :

- $\text{Tr}[\cos^2 \theta \rho(t)]$, qui est la valeur moyenne de l'observable $\cos^2 \theta$,
- et $\text{Tr}[\rho_{lin}^{(j_{max})} \rho(t)] / \text{Tr}[(\rho_{lin}^{(j_{max})})^2]$ qui correspond à la projection sur l'état cible définie par la polarisation linéaire $\rho_{lin}^{(j_{max})}$.

On envisage deux états cibles dont on donne l'évolution temporelle, l'un défini par une polarisation quelconque (trait plein), et la seconde, définie par une polarisation linéaire (trait pointillé). Enfin, on tracera ces quantités pour deux cas : lorsque l'état $\rho(t)$ appartient à un espace de dimension infinie (en trait plein), et lorsqu'il appartient à un espace tronqué de dimension finie (trait pointillé).

2.3.1 Stratégie du Maximum

Description de la Méthode :

Cette stratégie consiste à envoyer un train de kicks identiques dont seuls les délais sont optimisés [92, 93]. Les instants d'application des kicks sont définis comme suit. A l'instant $t = 0$, on applique le premier kick, il s'en suit une dynamique des états post-impulsion qui, dans un premier temps tend vers la cible supposée fixe durant l'action très courte du kick, pour retourner ensuite, sous l'effet de la relaxation, vers l'état d'équilibre de Gibbs. Ce qui signifie que nécessairement, à un instant donné $t_1 > t_0$, l'état dynamique du système est passé par un maximum local de $\langle \cos^2 \theta \rangle$. La stratégie du maximum consiste à envoyer le second kick précisément à l'instant t_1 . La procédure est répétée un certain nombre de fois afin d'optimiser de plus en plus l'efficacité de la procédure.

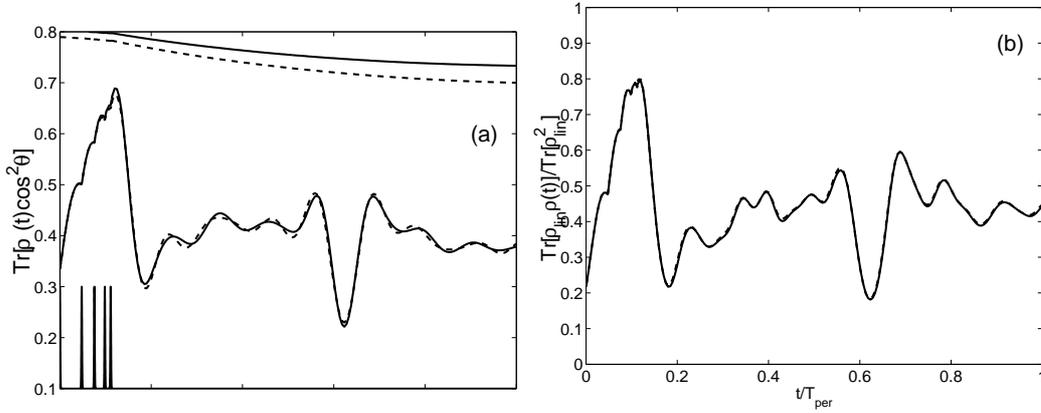


FIG. 2.3 – Dynamique de l’alignement pendant et après le train d’impulsions soudaines déterminées par la stratégie du maximum pour $T = 10$ K (les impulsions agissent sur le maximum global de $\text{Tr}[\rho(t) \cos^2 \theta]$). Les courbes en trait plein et pointillés de (a) représentent les propagations dans les espaces complet \mathcal{H} et réduit $\mathcal{H}^{(j_{max})}$. Le train d’impulsions est représenté en (a). La dynamique pour une polarisation quelconque et pour une polarisation linéaire sont respectivement indiquées par les courbes en traits solides et pointillés au sommet de la figure (a). La figure (b) donne l’évolution de la projection de l’état courant sur l’état cible.

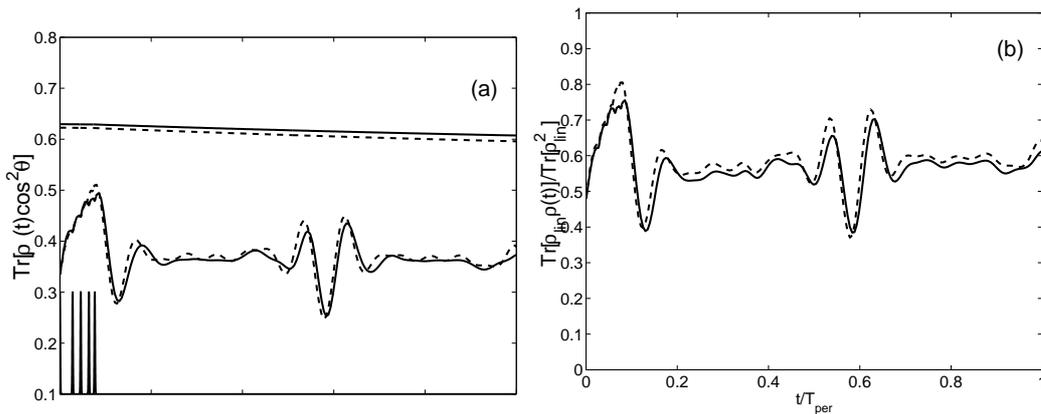


FIG. 2.4 – Mêmes figures que pour la 2.3 mais pour $T=50$ K.

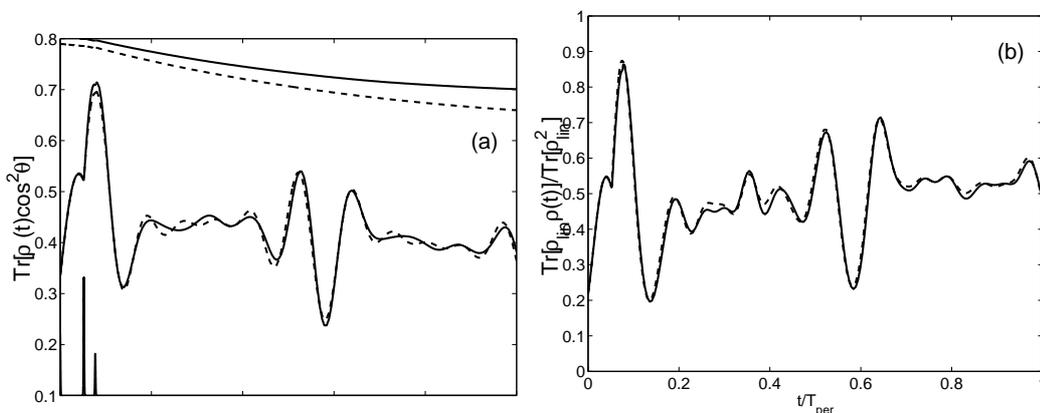


FIG. 2.5 – Mêmes courbes que pour la figure 2.3, obtenues par l’algorithme génétique.

Résultats Numériques :

Les figures 2.3 and 2.4 montrent les résultats obtenus pour le processus d’alignement en utilisant la stratégie du maximum. On utilise 5 impulsions d’intensité $\Omega_0/B = 500$. Un nombre plus important d’impulsions ne modifie pas significativement les résultats. Un choix adapté de Ω_0 , de j_{max} et du nombre d’impulsions permettent le succès de la stratégie de contrôle. La dynamique post-impulsions conduit à des résultats d’efficacité correcte d’environ 0.69 et 0.49 respectivement pour les températures $T = 10$ K et $T = 50$ K. Les projections correspondantes sur l’état cible sont égales à 0.79 et 0.76.

2.3.2 Algorithme Génétique

Description de la Méthode :

Dans cette partie, on optimise en utilisant un algorithme génétique dont les paramètres sont l’intensité des impulsions et les délais entre chacune d’elles [94]. L’objectif est de maximiser la projection sur la cible $\rho_{lin}^{(j_{max})}(t)$. L’étape d’identification de la cible montre ici toute son importance puisqu’aucune restriction telle que le nombre maximum de niveaux rotationnels d’énergie peuplés n’a à être envisagé. Cette restriction n’est nécessaire que lorsque le but du contrôle est la maximisation de $Tr[\rho(t) \cos^2 \theta]$.

Résultats Numériques :

Les figures 2.5 et 2.6 montrent les résultats d’une telle stratégie. On utilise seulement deux ou trois kicks. Une large partie des résultats est déjà obtenue avec deux kicks comme on peut le voir sur la figure 2.6. L’optimisation pour $T = 10$ K fournit un alignement d’efficacité de 0.72 pour une projection

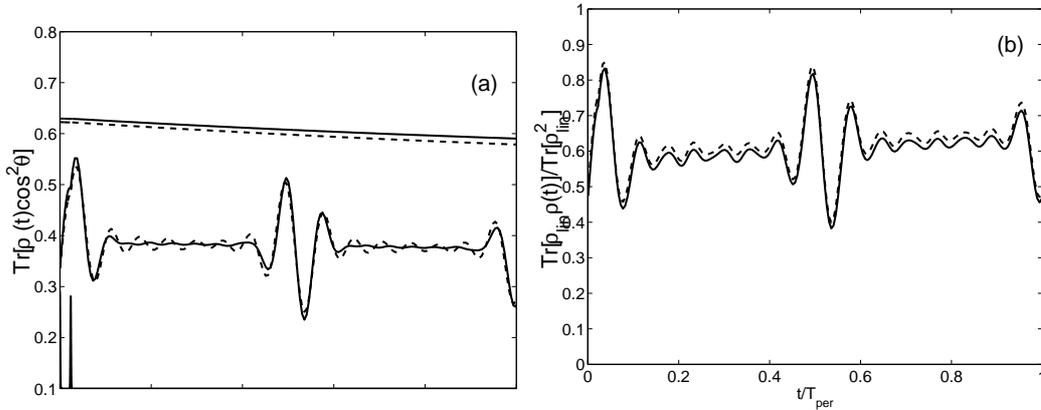


FIG. 2.6 – Mêmes courbes que pour la figure 2.5, mais pour $T = 50$ K et seulement deux impulsions.

sur l'état cible de l'ordre de 0.87, tandis qu'elle conduit seulement à 0.55 pour une projection de 0.84 pour $T = 50$ K. Quand deux impulsions sont appliquées, deux stratégies d'optimisation peuvent être déterminées comme illustré sur les figures 2.5 et 2.6 selon que l'on applique un kick juste après ou juste avant le maximum de $\text{Tr}[\rho(t) \cos^2 \theta]$. Ces deux stratégies donnent des résultats numériques comparables.

2.3.3 Analyse Comparative des Résultats

Les résultats que l'on obtient permettent d'effectuer quatre comparaisons.

- Température : plus la température est élevée, moins l'efficacité est importante. Ceci est un résultat auquel on s'attendait, car la relaxation croît avec la température.
- Dimension de l'espace de Hilbert : une comparaison des observables et des projections calculées en utilisant l'état $\rho(t)$ appartenant soit à l'espace de dimension finie, soit à la restriction dans le sous-espace de dimension finie confirme que l'essentiel de la dynamique se produit bel et bien au sein de $\mathcal{H}^{(j_{max})}$.
- Polarisation des kicks : l'évolution des états cibles définis via une polarisation quelconque est peu différente de celle obtenue via une polarisation linéaire, ce qui conforte le choix de la polarisation linéaire.
- Efficacité des méthodes : pour des efficacités du même ordre de grandeur, il faut moins de kicks avec la méthode de l'algorithme génétique par rapport à la stratégie du maximum. Par contre, la stratégie du maximum est plus systématique et plus robuste que l'algorithme génétique.

La dissipation joue un rôle complètement négatif. D'un côté, elle détériore

la dynamique en détruisant les cohérences du système, ce qui conduit à une perte d'alignement. D'un autre côté, elle détériore l'état cible, qui, après la première impulsion du train de kicks, ne cesse de décroître en efficacité.

Chapitre 3

Introduction à la Théorie du Contrôle Optimal

On présente ici l'ensemble des outils mathématiques nécessaires à la compréhension des chapitres suivants, basés sur la théorie du contrôle optimal [99, 95, 101]. Les systèmes que l'on considère sont de dimension finie, ce qui permet notamment de les aborder de façon géométrique. Typiquement, un problème de contrôle optimal se déroule en deux étapes bien distinctes. Dans un premier temps, on cherche à déterminer l'ensemble des états cibles que l'on peut atteindre grâce à un contrôle admissible : on étudie la *contrôlabilité* du système. Dans un deuxième temps, on détermine quelle forme de contrôle permet d'atteindre une cible en particulier tout en minimisant un critère de coût donné : on résout le problème du *contrôle optimal*.

Dans une première section, on définit d'un point de vue géométrique la notion de système contrôlé, c'est-à-dire que l'on caractérise le système que l'on étudie par la famille de champs de vecteur qui agit sur l'espace des états du système. L'étude de l'algèbre de Lie générée par cette famille de champ de vecteur permet notamment de déterminer quels états sont accessibles ou non à partir d'une condition initiale donnée. La seconde section contient le résultat principal de la théorie du contrôle optimal, à savoir le principe du maximum de Pontryagin. Ce dernier affirme que l'ensemble des trajectoires optimales (par rapport à un coût donné) d'un système contrôlé est contenu dans les solutions extrémales d'un problème associé de type Hamiltonien. Pour illustrer les différents concepts mis en avant, on termine ce chapitre par une troisième section présentant un exemple standard permettant de mettre en avant un type de solution fondamental pour les problèmes en temps minimum : les trajectoires « bang-bang ».

3.1 Systèmes Contrôlés et Ensemble Accessible

Cette première section introduit la notion de système contrôlé dont l'évolution temporelle, contrairement aux systèmes déterministes, n'est pas uniquement déterminée par la donnée d'une condition initiale, mais dépend également de paramètres dynamiques extérieurs au système¹. On s'intéresse à des systèmes contrôlés dont l'équation d'état s'apparente à une famille d'équations différentielles ordinaires.

3.1.1 Concepts de la Théorie des Equations Différentielles

La théorie des *équations différentielles ordinaires* (EDO) traite des processus d'évolution différentiables, déterministes et de dimension finie [96].

L'ensemble de tous les états possibles du système S étudié est une variété différentiable M de dimension finie n appelée *espace des états*², où tout élément x de M est représenté dans un système de coordonnées locales selon

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (3.1)$$

Sur cette variété, on définit un groupe à un paramètre de difféomorphismes locaux, c'est-à-dire une famille (g^t) d'applications inversibles et différentiables indexées par le temps $t \in \mathbb{R}$:

$$g^t : \begin{cases} \mathbb{R} \times M \longrightarrow M \\ g(t, x) = g^t x \end{cases} \quad (3.2)$$

et vérifiant la propriété de groupe :

$$g^{t+s} = g^t g^s \quad \forall t, s \in \mathbb{R}. \quad (3.3)$$

Si $x \in M$ est un état particulier du système S , alors la *trajectoire* γ de x sous l'action de g^t est l'application :

$$\gamma : \begin{cases} \mathbb{R} \longrightarrow M \\ \gamma(t) = g^t x \end{cases} \quad (3.4)$$

¹on entend par là que ces paramètres sont définis **indépendamment** de l'état du système

²on se limitera à l'espace euclidien \mathbb{R}^n ou à la sphère \mathbb{S}^n

dont l'image sous-ensemble de M est appelée la *courbe*.

Le *vecteur vitesse* $v(x)$ d'une trajectoire γ au point x est le vecteur défini par :

$$v(x) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} g^t x \quad (3.5)$$

et l'ensemble des vecteurs vitesses de toutes les trajectoires dont les courbes passent par x définit l'*espace tangent* à M en x noté $T_x M$. L'ensemble des vecteurs vitesses d'un point $x \in M$ donné définit une application :

$$F : \begin{cases} M \longrightarrow T_x M \\ F(x) = v(x), \end{cases} \quad (3.6)$$

appelée *champ de vecteur* dont l'image se décompose dans la base locale de l'espace tangent notée ³ $\left\{ \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right\}$ selon

$$F(x) = \sum_{i=1}^n F_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (3.7)$$

Une *forme différentielle* ω est une application linéaire $M \longrightarrow T_x^* M$, où $T_x^* M$ désigne l'espace dual de l'espace tangent, appelé *espace cotangent*. L'image d'une telle application se décompose dans la base locale de l'espace cotangent notée $\{dx_1, dx_2, \dots, dx_n\}$ selon

$$\omega(x) = \sum_{i=1}^n \omega_i(x) dx_i, \quad \text{avec} \quad dx_i \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \right) = \delta_{ij}. \quad (3.8)$$

Du point de vue géométrique, la solution de l'équation différentielle de dimension n

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x) \\ x(0) = x_0 \end{cases} \quad (3.9)$$

est l'unique trajectoire partant de x_0 dont le vecteur vitesse en x supposé lisse est $f(x)$.

3.1.2 Les Systèmes Dynamiques Contrôlés

On s'intéresse à présent à des processus d'évolution plus généraux que dans le paragraphe 3.1.1, dont la dynamique n'est pas complètement déterminée par une EDO mais dépend également d'un élément extérieur au système.

³pour une justification de cette notation, voir par exemple [98] chapitre 2

Soit M une variété différentiable de dimension n et U un sous-ensemble de \mathbb{R}^m appelé *domaine de commande*. On appelle *système dynamique contrôlé* tout processus d'évolution déterminé par l'équation d'état :

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, u) \\ x(0) = x_0 \end{cases} \quad (3.10)$$

où $f : M \times U \longrightarrow M$ est une fonction lisse par rapport à x et à u . D'un point de vue géométrique [99, 101], on peut concevoir le système (3.10) comme résultant de l'action sur la variété M d'une famille de champ de vecteurs (F_u) indexés par $u \in U$ tels qu'ils sont définis en (3.6), c'est-à-dire que l'on a :

$$F_u(x) = f(x, u). \quad (3.11)$$

Si l'on sélectionne un champ de vecteur particulier de la famille (F_u) , on réduit le système (3.10) à une EDO du type (3.9) dont on peut définir la trajectoire γ_u correspondante via (3.4). Ainsi le choix de la fonction u qui peut varier au cours du temps influe directement sur l'évolution du système et c'est pour cette raison qu'on l'appelle *contrôle* et l'ensemble U sur lequel il prend ses valeurs est le *domaine de commande*. De ce point de vue, l'état x du système est interprété comme la réponse au contrôle u .

On définit \mathcal{U} l'ensemble des *contrôles admissibles* par :

$$\mathcal{U} = \{u : [0, T] \rightarrow U \mid u \text{ est une fonction mesurable et bornée}\} \quad (3.12)$$

et on admettra que seule cette classe de contrôle permet d'assurer l'existence de solutions au système (3.10).

Par exemple en dimension 1, un contrôle admissible est une fonction bornée pouvant présenter des discontinuités (Figure 3.1) tandis que la trajectoire contrôlée correspondante x est une fonction continue pouvant présenter des points où la dérivée n'est pas définie (Figure 3.2).

Ainsi, un système contrôlé est un système susceptible d'adopter toute une gamme de dynamiques, et l'objectif principal de ce type de système est de déterminer précisément quelle stratégie de contrôle permet de réaliser l'évolution souhaitée.

Dans tout ce qui suit, on se limitera à l'étude d'une classe de systèmes particuliers appelés les *systèmes affines* qui ont la forme :

$$\dot{x} = F_0(x) + \sum_{k=1}^m u_k F_k(x) \quad (3.13)$$

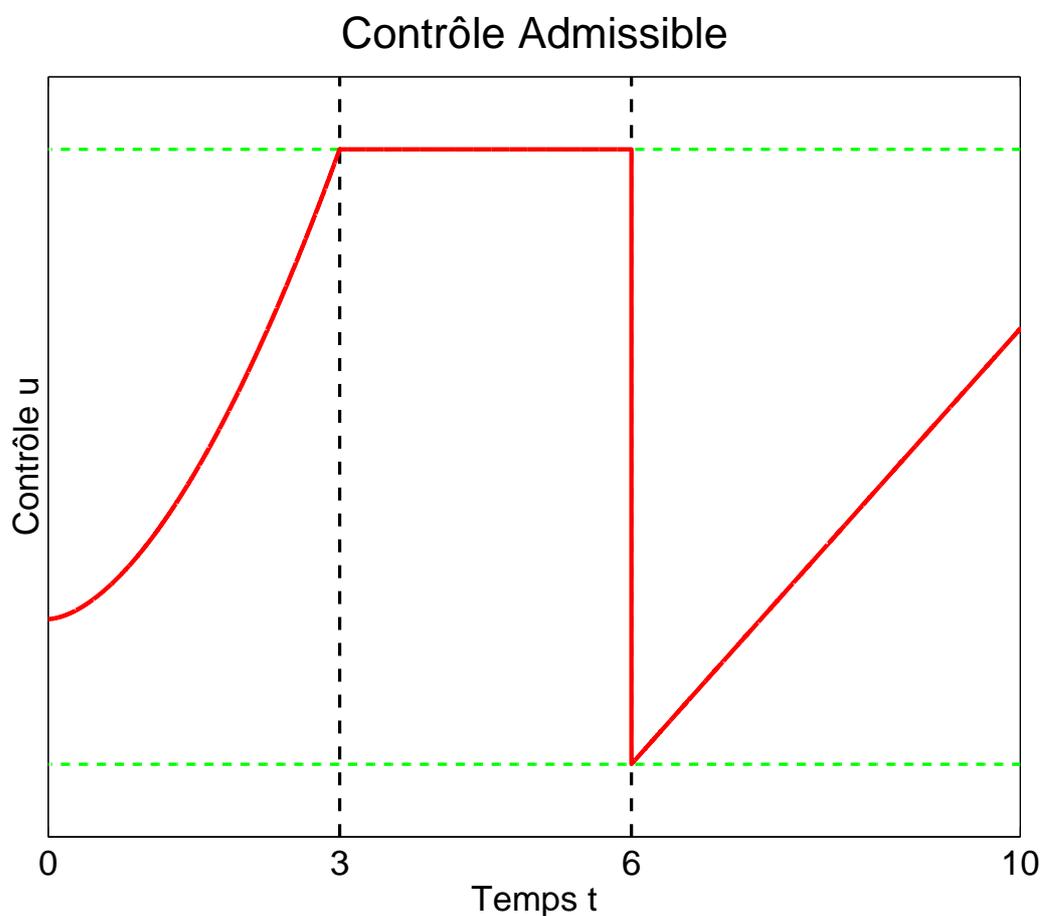


FIG. 3.1 – Exemple de contrôle admissible en dimension 1, ici le contrôle présente une discontinuité en $t = 6$.

où le terme $F_0(x)$ qui peut éventuellement être nul est appelé la *dérive*⁴

3.1.3 Ensemble Accessible et contrôlabilité

Un état x_1 du système (3.10) est dit *accessible* depuis x_0 lorsqu'on est capable de l'atteindre en temps fini, c'est-à-dire qu'il existe un contrôle $u \in U$ déterminant une trajectoire contrôlée γ_u et un instant $t \in [0, T]$ tels que :

$$\begin{cases} \gamma_u(0) = x_0 \\ \gamma_u(t) = x_1 \end{cases} . \quad (3.14)$$

⁴dans la mesure où, comme on le voit dans la formule (3.13), ce terme de dérive n'est couplé à aucune direction de contrôle, il est essentiellement non contrôlable.

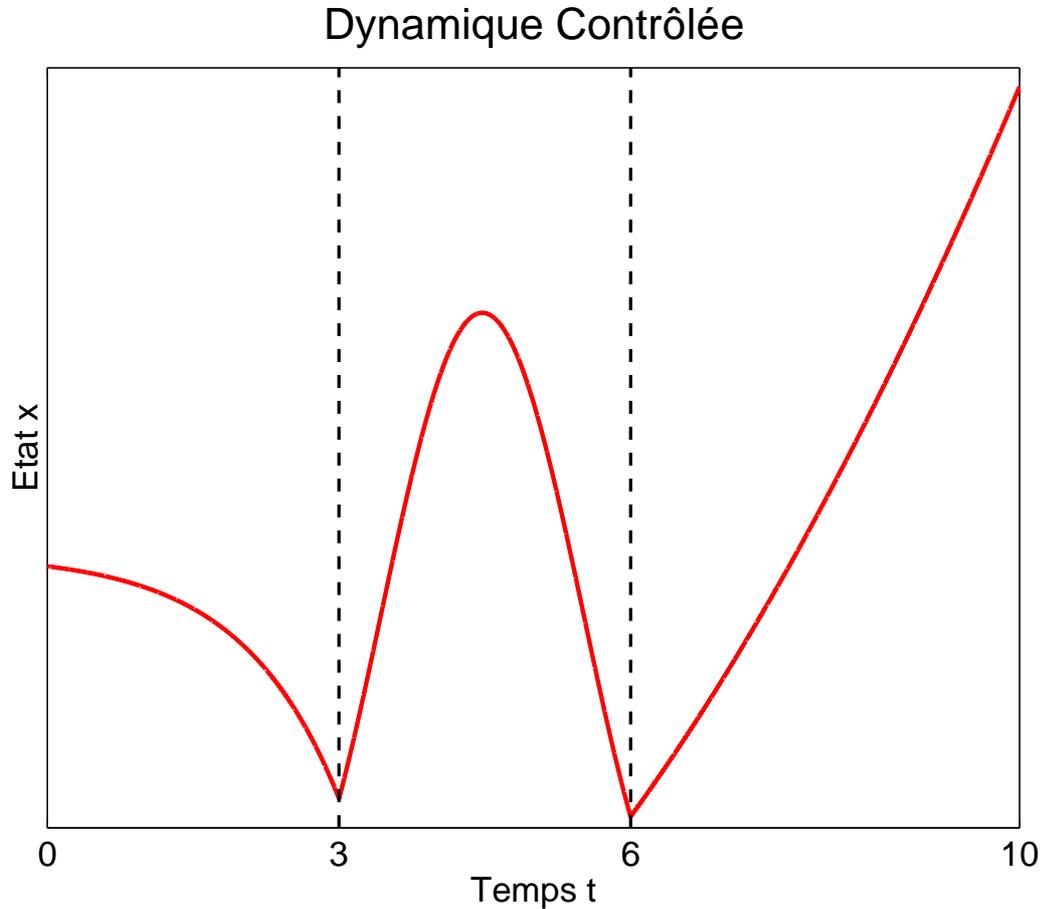


FIG. 3.2 – Trajectoire de la dynamique contrôlée en réponse au contrôle de la figure 3.1

La réunion sur tous les temps $t \in [0, T]$ des états accessibles depuis x_0 constitue l'ensemble accessible, notée $\mathcal{A}_{x_0}(T)$, et le système est dit :

- *complètement contrôlable* en x_0 si $\mathcal{A}_{x_0}(T) = M$,
- *localement contrôlable* en x_0 si $\mathcal{A}_{x_0}(T)$ est un voisinage de x_0 pour tout $T > 0$.

La première démarche dans un problème de contrôle optimal consiste à caractériser la structure de l'ensemble accessible et à déterminer la contrôlabilité du problème.

Dans le cas des systèmes affines $\dot{x} = F_0(x) + \sum_{k=1}^m u_k F_k(x)$, si le domaine de commande U est compact, alors l'ensemble accessible est compact, convexe, et varie continûment avec le temps [16].

La contrôlabilité est déterminée à partir de la structure de l'algèbre de Lie

engendrée par la famille de champ de vecteurs $\{F_k\}$ pour $k \in [0, m]$. On montre que si pour tous les points $x \in M$, la dimension de cette algèbre est n , alors le système est complètement contrôlable.

Pour les systèmes quantiques contrôlés, on utilise en pratique des caractérisations de la contrôlabilité directement sur l'algèbre de Lie générée par la famille d'Hamiltonien définissant le système, c'est-à-dire l'algèbre associée au groupe agissant sur la variété (voir chapitre 4, section 2).

3.2 Le Problème du Contrôle Optimal

On considère un système contrôlé dont x_0 est l'état initial, et dont $x_1 \in \mathcal{A}_{x_0}(T)$ est l'état cible. A partir d'une fonctionnelle donnée, on définit pour ce système un critère de coût. L'objectif d'un problème de contrôle optimal est alors de déterminer la trajectoire contrôlée (en déterminant la forme du champ de contrôle) permettant de conduire x_0 à x_1 en minimisant le coût.

Le problème de contrôle optimal se pose donc sous la forme :

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, u) \\ x(0) = x_0 \\ x(T) = x_1 \\ \min \int_0^T c(x(t), u(t)) dt \end{cases} \quad (3.15)$$

Remarque 1 : le temps final T peut être fixé, ou libre.

Remarque 2 : lorsqu'on ne fixe pas la condition finale x_1 et que l'on souhaite résoudre le problème de contrôle optimal pour tout l'ensemble $\mathcal{A}_{x_0}(T)$, on a un problème de synthèse optimale (voir chapitre 5).

3.2.1 Les Coûts Temps et Energie

Dans le cadre du contrôle quantique, où les systèmes sont contrôlés par un champ laser environnant, on définit deux coûts utiles en physique :

- le coût unité $c(x, u) = 1$, qui intégré entre les instants 0 et T correspond à la durée T ,

- le coût quadratique $c(x, u) = \sum_{k=1}^m u_k^2$, qui correspond à l'énergie E mise en jeu par les champs laser.

On peut dégager quelques justifications du choix de ces coûts étant donné les situations physiques que l'on étudie.

Par exemple il est naturel de vouloir minimiser l'énergie du champ de contrôle pour éviter d'exciter une gamme trop importante de niveaux d'énergie du système (et ainsi conforter nos modèles de faibles dimensions) ; mais aussi pour éviter de mettre en jeu des intensités laser trop importantes qui détruiraient en partie le système (au travers d'un processus d'ionisation ou de dissociation).

De plus, minimiser la durée de contrôle par champ laser d'un système quantique peut se révéler particulièrement judicieux dans le cas dissipatif précisément pour ne pas laisser à la dissipation le temps de s'exprimer.

Même si la théorie générale du contrôle optimal prévoit des coûts pouvant dépendre de l'état x , ceux auxquels on s'intéresse ne font intervenir que le contrôle u , et ceci a un certain nombre de conséquences intéressantes pour les systèmes affines que l'on étudie, en particulier ceux dépourvus de dérive.

3.2.2 Le Principe du Maximum de Pontryagin

Le principe du maximum de Pontryagin (PMP) fournit les conditions nécessaires d'optimalité d'un problème de contrôle optimal [100].

Théorème 1 *Etant donnés :*

- M une variété différentiable (typiquement \mathbb{R}^n ou \mathbb{S}^n) et x_0 un point de cette variété,

- $u \in \mathcal{U}$ un contrôle admissible, c'est-à-dire une fonction du temps mesurable et bornée définie sur un intervalle $[0, T]$ et à valeurs dans $U \subset \mathbb{R}^m$,

- f et c deux applications $M \times U \rightarrow M$ de classe \mathcal{C}^1 par rapport à x et à u , définissant complètement le problème de contrôle optimal :

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x(t), u(t)) \\ x(0) = x_0 \\ \min \int_0^T c(x(t), u(t)) dt \end{cases} \quad (3.16)$$

Si le contrôle $\tilde{u}(t)$ détermine la trajectoire optimale (qui minimise le coût) partant de $x(0)$ et aboutissant en $x(T) \in \mathcal{A}_{x_0}(T)$, alors il existe un vecteur $p(t) \in T^*M$ absolument continu appelé co-état et une constante $\lambda \leq 0$ telle que :

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \text{et} \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (3.17)$$

où l'Hamiltonien $H(x, p)$ vérifie la condition de maximisation :

$$H(x, p) = \max_u \mathcal{H}(x, p, u) \quad (3.18)$$

sur la famille d'Hamiltoniens $\mathcal{H}(x, p, u)$ définis par :

$$\mathcal{H}(x, p, u, \lambda) = p \cdot f(x, u) + \lambda \cdot c(x, u). \quad (3.19)$$

Les trajectoires définies par (3.17), (3.18) et (3.19) sont appelées *extrémales*.

Si $\lambda = 0$, alors l'extrémale est *anormale*.

Si $p \neq 0$ et $\frac{\partial}{\partial u} [p \cdot f(x, u)] = 0$, alors l'extrémale est *singulière*.

Le PMP énonce donc que les trajectoires optimales recherchées sont nécessairement les extrémales d'un système étendu (dans le sens où on lui a adjoint le vecteur p) possédant la structure Hamiltonienne d'un problème de mécanique classique : d'une manière très résumée on dit que « les optimales sont contenues dans les extrémales ».

Plusieurs remarques sont à formuler sur le PMP.

Remarque 1 : Le PMP est un résultat *constructif* dans le sens où il permet de déterminer explicitement les expressions des trajectoires optimales et des contrôles leurs donnant naissance.

Remarque 2 : La réciproque du PMP est fautive en général : on n'est jamais assuré que toutes les extrémales obtenues via le PMP soient nécessairement optimales.

Remarque 3 : Le couple (p, λ) est nécessairement non trivial, c'est-à-dire que ces deux quantités ne peuvent s'annuler en même temps, sans quoi l'Hamiltonien $\mathcal{H}(x, p, u)$ n'est pas défini.

Remarque 4 : Attendu que la constante λ , toujours de même signe, n'influence pas directement sur la détermination des extrémales (elle ne modifie qu'à un facteur multiplicatif près le contrôle optimal) elle peut être fixée arbitrairement.

Remarque 5 : L'Hamiltonien maximisé $H(x, p)$ est autonome (il ne dépend pas explicitement du temps), c'est donc une constante du mouvement. De plus, si le temps final T est libre, on peut arbitrairement fixer cette constante à 0.

Remarque 6 : En l'absence de contraintes sur le contrôle, c'est-à-dire si $U = \mathbb{R}^m$, la condition de maximisation (3.18) devient : $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} = 0$.

En pratique, l'obtention de l'Hamiltonien extrémal (3.18) se déroule en trois

étapes.

1. D'abord, en introduisant le co-état p et la constante λ , on construit la famille d'Hamiltonien \mathcal{H} associée au problème via la formule (5.10).
2. Puis on maximise cette famille d'Hamiltoniens sur l'ensemble U , cette seconde étape détermine explicitement l'expression du contrôle optimal \tilde{u} en fonction de x et p .
3. Enfin, on réinjecte le contrôle $\tilde{u}(x, p)$ dans l'expression de \mathcal{H} pour obtenir l'Hamiltonien maximisé H seulement fonction de x et de p .

La résolution des équations (3.17) est un autre problème très vaste [102][97], on rappellera simplement qu'un tel système d'équations Hamiltoniennes est intégrable au sens de Liouville (des solutions existent) si et seulement si le système compte $n-1$ (compte tenu de la Remarque 5 sur le PMP) constantes du mouvement en involution ⁵.

On peut calculer l'Hamiltonien maximisé dans le cas des systèmes affines en temps et en énergie minimum.

Dans le cas d'un système affine en temps minimum, on a :

$$\begin{cases} \dot{x} = F_0(x) + \sum_{k=1}^m u_k F_k(x) & |u| \leq 1 \\ x(0) = x_0 \\ \min \int_0^T dt = \min T & (T \text{ est libre}) \end{cases} . \quad (3.20)$$

En normalisant à $\lambda = -1$, la famille d'Hamiltoniens est donnée par :

$$\mathcal{H}(x, p, u, -1) = P_0 + \sum_{k=1}^m u_k P_k - 1, \quad (3.21)$$

où l'on définit pour tout $k \in [0, m]$

$$P_k = p \cdot F_k(x). \quad (3.22)$$

Sous la contrainte $|u| \leq 1$, la condition de maximisation de \mathcal{H} implique que \tilde{u} appartient au bord du domaine U , et on a dans ce cas :

$$\tilde{u}_k = \frac{P_k}{\sqrt{\sum_{k=1}^m P_k^2}}, \quad (3.23)$$

⁵Deux quantités dynamiques $A(x, p)$ et $B(x, p)$ sont en involution si leur crochet de Poisson $\{A, B\}$ est nul, c'est-à-dire si $\sum_{k=1}^n (\frac{\partial A}{\partial x_k} \frac{\partial B}{\partial p_k} - \frac{\partial B}{\partial x_k} \frac{\partial A}{\partial p_k}) = 0$

et l'Hamiltonien maximisé est :

$$H(x, p) = P_0 + \sqrt{\sum_{k=1}^m P_k^2} - 1. \quad (3.24)$$

Dans le cas d'un système affine en énergie minimum, on a :

$$\begin{cases} \dot{x} = F_0(x) + \sum_{k=1}^m u_k F_k(x) \\ x(0) = x_0 \\ \min \int_0^T (\sum_{k=1}^m u_k^2) dt \end{cases}. \quad (3.25)$$

En normalisant à $\lambda = -\frac{1}{2}$, la famille d'Hamiltoniens est donnée par :

$$\mathcal{H}(x, p, u, -\frac{1}{2}) = P_0 + \sum_{k=1}^m u_k P_k - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m u_k^2. \quad (3.26)$$

En l'absence de contraintes sur u , la condition de maximisation de \mathcal{H} devient $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} = 0$, ce qui implique pour tout $k \in [1, m]$:

$$\tilde{u}_k = P_k, \quad (3.27)$$

et l'Hamiltonien maximisé est :

$$H(x, p) = P_0 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m P_k^2. \quad (3.28)$$

3.3 Exemple : Trajectoires « Bang-Bang »

Afin d'illustrer les différents concepts théoriques précédemment définis, mais aussi pour dégager certains principes essentiels de la théorie du contrôle optimal qui seront utiles par la suite (notamment dans le chapitre 5), on étudie le système contrôlé de dimension 2 suivant :

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ 0 \end{pmatrix} + u \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

On souhaite conduire en temps minimum le système initialement dans un état $x_0 = (0, 1)^t$ jusqu'à l'état cible $x_1 = (0, 0)^t$ grâce à un contrôle borné à l'unité $|u| \leq 1$.

L'étude d'un problème de contrôle optimal se déroule en deux étapes distinctes : d'abord on détermine la contrôlabilité du problème en recherchant l'ensemble accessible à partir de la condition initiale qu'on s'est donnée, puis on détermine les extrémales du système en appliquant le PMP.

Pour le système (3.29), on détermine la contrôlabilité du problème en utilisant le résultat suivant (voir [99], chapitre 3) :

Proposition 1 Soient $x \in \mathbb{R}^n$, A une matrice $n \times n$ à coefficients constants et b un vecteur de dimension n constant. Tout système contrôlé de la forme $\dot{x} = Ax + ub$ est complètement contrôlable si et seulement si le sous-espace vectoriel engendré par la famille des n vecteurs $\{b, Ab, A^2b, \dots, A^{n-1}b\}$ est l'espace \mathbb{R}^n tout entier.

Pour le système que l'on étudie on a

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

et il est donc complètement contrôlable puisque les vecteurs $b = (0 \ 1)^t$ et $Ab = (1 \ 0)^t$ ne sont autres que les vecteurs de la base orthonormée de \mathbb{R}^2 . On peut à présent appliquer le PMP : en introduisant le vecteur $p = (p_1 \ p_2) \in \mathbb{R}^2$, on définit la fonction

$$\mathcal{H}(x, p, u, \lambda) = x_2 p_1 + u p_2 + \lambda \quad (3.31)$$

que l'on cherche à maximiser sur l'ensemble des contrôles $u \in U$. Le seul terme impliquant le contrôle est $u p_2$ et par suite $\mathcal{H}(x, p, u)$ est maximum lorsque $u = \text{sgn}(p_2)$.

Ainsi, les trajectoires optimales sont obtenues sous le contrôle $u = \pm 1$. De telles trajectoires sont dites *bang* lorsqu'elles correspondent à un contrôle de signe constant $u = \pm 1$; et *bang-bang* lorsqu'elles résultent d'un changement de signe de u , appelé *commutation* (voir figure 3.3).

A partir de l'Hamiltonien $H = x_2 p_1 \pm p_2$, on peut dériver les équations des trajectoires extrémales :

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = \pm 1 \\ \dot{p}_1 = 0 \\ \dot{p}_2 = -p_1 \end{cases} \quad (3.32)$$

En notant $(x_1^0, x_2^0, p_1^0, p_2^0)^t$ la condition initiale du système Hamiltonien (3.32), la solution générale s'écrit :

$$\begin{cases} x_1(t) = \pm \frac{t^2}{2} + x_2^0 t + x_1^0 \\ x_2(t) = \pm t + x_2^0 \\ p_1(t) = p_1^0 \\ p_2(t) = -p_1^0 t + p_2^0 \end{cases} \quad (3.33)$$

En se basant sur ces dernières équations, un calcul direct permet de montrer que pour atteindre l'origine en partant de l'état initial $(0, 1)^t$, il faut d'abord suivre une trajectoire correspondant au contrôle $u = -1$. Puis à l'instant $t_C = 1 + \frac{1}{\sqrt{2}}$, il faut commuter et suivre une trajectoire issue du contrôle $u = +1$ (voir figure 3.3).

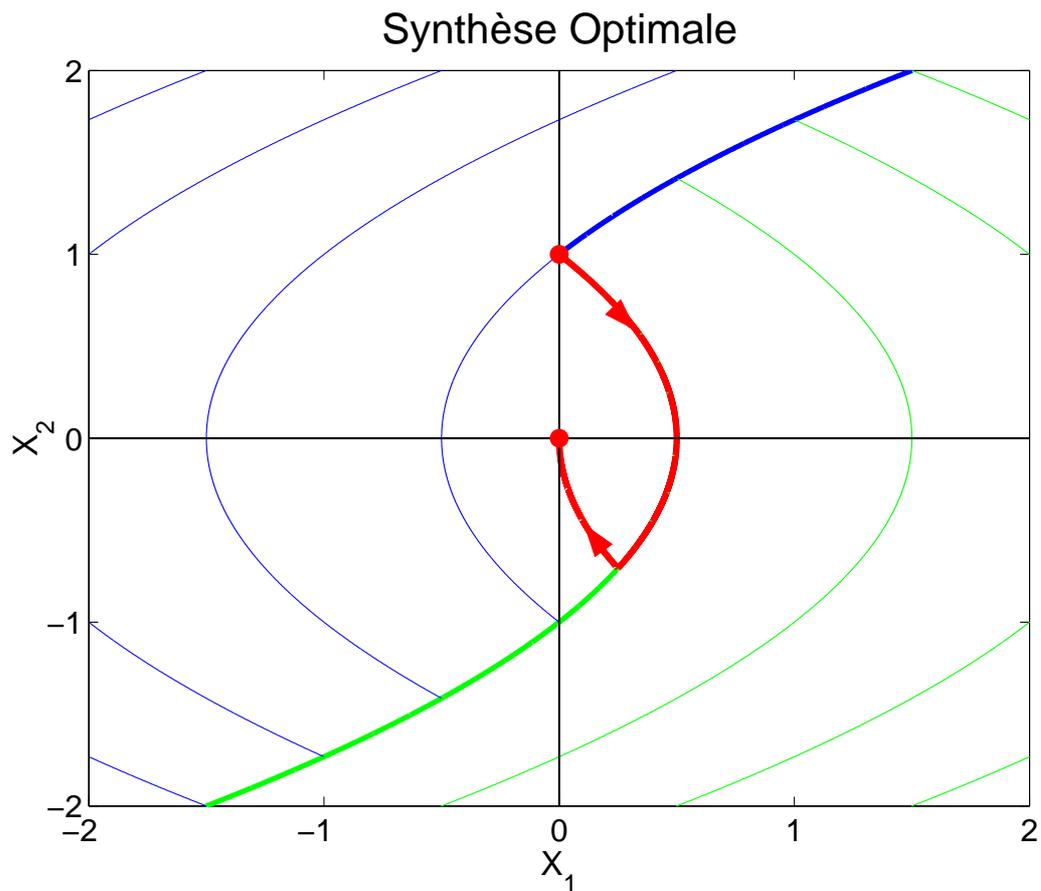


FIG. 3.3 – Ensemble des trajectoires optimales (en temps minimum) résultant des contrôles $u = \pm 1$. Pour atteindre l'origine en partant du point initial $(0, 1)^t$ il faut d'abord suivre le contrôle $u = -1$, puis commuter en $u = +1$: il s'agit d'une trajectoire *bang-bang*.

Chapitre 4

Modélisation et Contrôlabilité des Systèmes à N Niveaux

Ce chapitre présente les classes de systèmes quantiques contrôlés sur lesquels on va appliquer la théorie du contrôle optimal, en temps ou en énergie minimum. On envisage des systèmes à N niveaux, dont les plus proches voisins sont couplés par un ensemble de $2N - 2$ champs laser polarisés linéairement. De tels systèmes, qu'ils soient fermés ou ouverts, sont équivalents à des systèmes contrôlés affines.

Ce chapitre s'articule en trois sections. Dans la première section, on donne la forme de l'Hamiltonien des systèmes quantiques contrôlés que l'on va considérer dans les chapitres 5 et 6. Il s'agit d'Hamiltoniens d'interaction résonnants dans le cadre de l'approximation RWA. Dans la seconde section, on énonce pour de tels systèmes quelques résultats sur la contrôlabilité, c'est-à-dire la capacité de pouvoir conduire un état du système dans n'importe quel autre état qui lui est accessible. Enfin dans la dernière section, on montre comment l'équation de Schrödinger et l'équation de Lindblad se ramènent, en dimension finie, à des systèmes affines respectivement sans et avec dérive.

4.1 Hamiltonien d'Interaction RWA

Dans cette section, on commence par établir les Hamiltoniens d'interaction $H_0 + H_1$ envisagés par la suite. Pour simplifier leur expression, ces Hamiltoniens sont écrits en représentation d'interaction, où la partie diagonale de l'Hamiltonien libre H_0 n'apparaît pas; et considérés comme résonnants et moyennés en temps selon l'approximation RWA.

4.1.1 Représentation d'Interaction

Soit l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle, \quad (4.1)$$

et soit une transformation unitaire $U(t)$ telle que :

$$|\Psi(t)\rangle = U(t) |\tilde{\Psi}(t)\rangle. \quad (4.2)$$

Un calcul direct (en insérant 4.2 dans 4.1) montre que la structure de l'équation de Schrödinger est invariante sous l'action de la transformation unitaire, c'est-à-dire que le vecteur d'état $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ vérifie :

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}(t)\rangle = \tilde{H}(t) |\tilde{\Psi}(t)\rangle, \quad (4.3)$$

avec le nouvel Hamiltonien $\tilde{H} = U^{-1}(HU - i \frac{\partial}{\partial t} U)$. L'action de la transformation U est appelée *changement de représentation*.

Dans le cas d'un système contrôlé $H = H_0 + H_1$, on a

$$\tilde{H} = U^{-1}H_0U + U^{-1}H_1U - iU^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U, \quad (4.4)$$

et on appelle *représentation d'interaction* l'action de la transformation U_0 , définie par le propagateur libre solution de :

$$i \frac{\partial}{\partial t} U_0(t, t_0) = H_0 U_0(t, t_0) \quad \text{avec} \quad U_0(t_0, t_0) = \mathcal{I}. \quad (4.5)$$

Dans la base propre de H_0 , cette transformation U_0 s'écrit :

$$U_0 = \begin{pmatrix} e^{-iE_1 t} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-iE_2 t} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & e^{-iE_3 t} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e^{-iE_N t} \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Les systèmes physiques que l'on considère sont des systèmes à N niveaux, interagissant avec un ensemble de $2N - 2$ lasers polarisés linéairement, sélectionnés pour coupler de façon résonnante les états voisins de plus proche énergie.

Autrement dit, dans la base propre de H_0 , l'Hamiltonien contrôlé s'écrit :

$$H_1 = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}(t) = -\mu_x E_x(t) - \mu_y E_y(t), \quad (4.7)$$

avec :

$$-\mu_x E_x(t) = \begin{pmatrix} 0 & 2u_1 \cos(\omega_1 t) & 0 & \dots & 0 \\ 2u_1 \cos(\omega_1 t) & 0 & 2u_3 \cos(\omega_2 t) & \dots & 0 \\ 0 & 2u_3 \cos(\omega_2 t) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

et

$$-\mu_y E_y(t) = \begin{pmatrix} 0 & 2iu_2 \cos(\omega_1 t) & 0 & \dots & 0 \\ -2iu_2 \cos(\omega_1 t) & 0 & 2iu_4 \cos(\omega_2 t) & \dots & 0 \\ 0 & -2iu_4 \cos(\omega_2 t) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix},$$

c'est-à-dire

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & \Omega_1(t) & 0 & \dots & 0 \\ \Omega_1^*(t) & 0 & \Omega_2(t) & \dots & 0 \\ 0 & \Omega_2^*(t) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

avec pour tout $k \in [1 : N - 1]$:

$$\Omega_k(t) = 2(u_{2k-1}(t) + iu_{2k}(t)) \cos(\omega_k t) \quad \text{où} \quad \omega_k = E_{k+1} - E_k. \quad (4.9)$$

En représentation d'interaction, cet Hamiltonien s'écrit

$$\tilde{H} = U_0^{-1} H_1 U_0 = \begin{pmatrix} 0 & \Omega_1(t)e^{-i\omega_1 t} & 0 & \dots & 0 \\ \Omega_1^*(t)e^{i\omega_1 t} & 0 & \Omega_2(t)e^{-i\omega_2 t} & \dots & 0 \\ 0 & \Omega_2^*(t)e^{i\omega_2 t} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

4.1.2 Approximation RWA

En posant $\cos(\omega_k t) = \frac{e^{i\omega_k t} + e^{-i\omega_k t}}{2}$, on a

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} 0 & (u_1 + iu_2)(1 + e^{-2i\omega_1 t}) & 0 & \dots & 0 \\ (u_1 - iu_2)(1 + e^{2i\omega_1 t}) & 0 & (u_3 + iu_4)(1 + e^{-2i\omega_2 t}) & \dots & 0 \\ 0 & (u_3 - iu_4)(1 + e^{2i\omega_2 t}) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

L'*approximation du repère tournant* (RWA) consiste à négliger les termes $e^{\pm 2i\omega_k t}$ qui oscillent très rapidement avec une valeur moyenne nulle [103, 104, 105]. L'Hamiltonien \tilde{H} est donc approximé par :

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} 0 & (u_1 + iu_2) & 0 & \dots & 0 \\ (u_1 - iu_2) & 0 & (u_3 + iu_4) & \dots & 0 \\ 0 & (u_3 - iu_4) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

4.2 Contrôlabilité des Systèmes à N Niveaux

Dans cette section, on rappelle certains résultats concernant la contrôlabilité des systèmes quantiques en dimension finie, d'abord pour les systèmes fermés [108, 109], puis pour les systèmes ouverts [111, 112]. En s'appuyant sur le développement de Magnus [117], on peut déterminer si le système est contrôlable à partir du calcul de la dimension du groupe de Lie [113, 114, 115, 116] généré par l'Hamiltonien contrôlé caractérisant le système. L'étude du cas infini, qui nécessite une toute autre démarche, a été abordée dans plusieurs articles [106, 107].

4.2.1 Notions de Contrôlabilité

Pour un système quantique S de dimension N finie, décrit par un Hamiltonien contrôlé H , On peut définir trois notions de contrôlabilité.

Un état pur du système S est représenté par un vecteur d'état $|\Psi\rangle$ qui évolue selon l'équation de Schrödinger :

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle. \quad (4.12)$$

On dit alors que le système S est *contrôlable au sens des états purs* si le système peut être conduit, sous l'action d'un champ de contrôle admissible, de tout état pur initial à tout état pur final.

Pour un système fermé, l'équation de Schrödinger est équivalente à l'équation de Liouville-von Neumann, où l'état du système est défini par son opérateur densité ρ :

$$i\dot{\rho}(t) = [H(t), \rho(t)], \quad (4.13)$$

qui se généralise, lorsque le système est ouvert, à l'équation de Lindblad. Un état ρ_1 est dit *cinématiquement accessible* à partir d'un état ρ_0 s'il lui est

unitairement équivalent¹.

On dit alors que le système S est *contrôlable au sens des états mélangés* si le système peut être conduit, sous l'action d'un champ de contrôle admissible, de tout état mélangé initial à tout état mélangé qui lui est cinématiquement accessible. On parle parfois de *réalisation dynamique* de l'accessibilité cinématique.

Enfin, la solution de l'équation de Schrödinger (4.12) peut s'exprimer formellement sous la forme

$$\Psi(t) = U(t, t_0)\Psi(t_0), \quad (4.14)$$

où U est un opérateur unitaire, appelé *opérateur d'évolution*, vérifiant

$$i\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0) \quad \text{avec} \quad U(t_0, t_0) = \mathcal{I}. \quad (4.15)$$

On dit alors que le système S est *complètement contrôlable* si l'opérateur identité \mathcal{I} , peut être transformé, sous l'action d'un champ de contrôle admissible, en n'importe quel opérateur d'évolution.

Ces trois notions de contrôlabilité ne sont pas complètement indépendantes, et on montre en particulier que la complète contrôlabilité implique la contrôlabilité au sens des états mélangés, qui elle-même implique la contrôlabilité au sens des états purs.

La notion la plus forte de contrôlabilité est donc la complète contrôlabilité, et c'est donc celle qu'on cherche à caractériser en général.

4.2.2 Cas des Systèmes Fermés

On s'intéresse maintenant à la classe des Hamiltoniens bilinéaires [110], c'est-à-dire aux Hamiltoniens contrôlés par un ensemble de m champs réels u_k :

$$H(t) = H_0 + \sum_{k=1}^m u_k(t)H_k, \quad (4.16)$$

où les opérateurs hermitiens H_k sont indépendants du temps.

Il est immédiat de vérifier que l'Hamiltonien d'interaction RWA \tilde{H}_1 (4.11) décrit dans la section 1 appartient à cette classe.

Pour de tels systèmes quantiques, on a le résultat suivant [108] :

Proposition 2 *Un système fermé contrôlé de dimension N , de loi d'évolution $\dot{\Psi}(t) = H(t)\Psi(t)$, est complètement contrôlable si et seulement si l'algèbre de Lie dynamique générée par la famille d'opérateurs anti-hermitiens $\{iH_k\}_{k=[0,m]}$ est isomorphe à $u(N)$.*

¹autrement dit ρ_0 et ρ_1 ont le même spectre

En pratique, pour montrer que le système est complètement contrôlable, il suffit de montrer que l'algèbre de Lie dynamique est de dimension N^2 . D'une manière générale, les systèmes fermés sont complètement contrôlables.

4.2.3 Cas des Systèmes Ouverts

Dans le cas des systèmes ouverts, dont la dynamique est donnée par l'équation de Lindblad, le système est en général non complètement contrôlable [118, 123]. Ceci est dû au fait que localement, le contrôle ne peut jamais compenser les effets de décohérence dus à la dissipation. En effet, il est possible de montrer par un calcul direct que la dérivée par rapport au temps de la pureté du système $\frac{\partial}{\partial t} \text{Tr}[\rho^2]$ est indépendante des champs de contrôles u_k [111, 112]. Cependant, on peut énoncer un résultat sur l'accessibilité.

Proposition 3 *Un système ouvert contrôlé de dimension N sous la forme de Redfield $\dot{\rho} = L_0\rho + uL_1\rho$ est accessible s'il est isomorphe au groupe de Lie $\mathfrak{gl}(N)$ ou à la somme semi-directe $\mathfrak{gl}(N) \oplus \mathbb{R}^2$.*

4.3 Equations Dynamiques Contrôlées

On peut montrer à présent comment passer des équations dynamiques de la mécanique quantique à un système d'équations différentielles réelles $\dot{x} = f(x, u)$ tel qu'il est traité dans la théorie du contrôle optimal. On effectue d'abord le calcul dans le cas d'un système fermé représenté par un état pur, puis pour un système ouvert représenté par un opérateur densité.

4.3.1 Cas des Systèmes Fermés

En partant de l'équation de Schrödinger contrôlée

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \tilde{H}_1(t) |\Psi(t)\rangle \quad (4.17)$$

on développe le vecteur $|\Psi\rangle \in \mathbb{C}^N$ comme :

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} x_1 + ix_2 \\ x_3 + ix_4 \\ \vdots \\ x_{2N-1} + ix_{2N} \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Les composantes réelles caractérisant l'état dynamique x du système contrôlé $\dot{x} = f(x, u)$ sont les parties réelles et imaginaires des composantes du vecteur d'état quantique. De plus, la normalisation du vecteur d'état implique

$\sum_k x_k^2 = 1$, et cette contrainte implique que $x \in \mathbb{S}^{2N-1}$.

En injectant cette expression du vecteur Ψ dans l'équation de Schrödinger, on obtient le système dynamique réel :

$$\dot{x} = Ax \quad (4.19)$$

où

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{2N-1} \\ x_{2N} \end{pmatrix} \in \mathbb{S}^{2N-1} \quad (4.20)$$

et A est une matrice réelle $\mathbb{R}^{2N} \times \mathbb{R}^{2N}$, dépendant uniquement des fonctions de contrôles $u_k(t)$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & u_2 & u_1 & \dots \\ 0 & 0 & -u_1 & u_2 & \dots \\ -u_2 & u_1 & 0 & 0 & \dots \\ -u_1 & -u_2 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Ce système linéaire peut s'écrire en terme de champs de vecteurs :

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \\ \dot{x}_4 \\ \vdots \\ \dot{x}_{2k-1} \\ \dot{x}_{2k} \\ \dot{x}_{2k+1} \\ \dot{x}_{2k+2} \\ \vdots \\ \dot{x}_{2N-3} \\ \dot{x}_{2N-2} \\ \dot{x}_{2N-1} \\ \dot{x}_{2N} \end{pmatrix} = u_1 \begin{pmatrix} x_4 \\ -x_3 \\ x_2 \\ -x_1 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + u_{2k-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ x_{2k+2} \\ -x_{2k+1} \\ x_{2k} \\ -x_{2k-1} \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + u_{2k} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ x_{2k+1} \\ x_{2k+2} \\ -x_{2k-1} \\ -x_{2k} \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + u_{2N-2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ x_{2N-1} \\ x_{2N} \\ -x_{2N-3} \\ -x_{2N-2} \end{pmatrix}.$$

L'équation de Schrödinger contrôlée est donc équivalente à un système contrôlé réel, affine et *sans dérive*.

Exemple : Dans le chapitre 6, on s'intéresse au cas $N = 3$, on a les équations :

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \\ \dot{x}_4 \\ \dot{x}_5 \\ \dot{x}_6 \end{pmatrix} = u_1 \begin{pmatrix} x_4 \\ -x_3 \\ x_2 \\ -x_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + u_2 \begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \\ -x_1 \\ -x_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + u_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ x_6 \\ -x_5 \\ x_4 \\ -x_3 \end{pmatrix} + u_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ x_5 \\ x_6 \\ -x_3 \\ -x_4 \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

4.3.2 Cas des Systèmes Ouverts

C'est un peu plus délicat que dans le cas des systèmes fermés, car pour des systèmes de dimension N , il faut utiliser le vecteur de Bloch généralisé [119, 120, 121], qui possède des propriétés géométriques assez complexes en dehors du cas particulier $N = 2$. On note simplement que compte tenu des propriétés caractéristiques de l'opérateur densité, on peut extraire exactement $N^2 - 1$ composantes réelles.

On montre alors que l'équation de Lindblad contrôlée est équivalente à un système contrôlé réel, affine et *avec dérive*. De plus, en représentation d'interaction, le terme de dérive contient toute l'information contenue dans l'opérateur de dissipation.

On peut cependant détailler l'exemple en dimension 2 qui est étudié dans le chapitre 5.

En représentation d'interaction et sous forme de Redfield, l'équation de Lindblad s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11} \\ \dot{\rho}_{12} \\ \dot{\rho}_{21} \\ \dot{\rho}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\gamma_{12} & 0 & 0 & \gamma_{21} \\ 0 & -\Gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Gamma & 0 \\ \gamma_{12} & 0 & 0 & -\gamma_{21} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} \\ \rho_{12} \\ \rho_{21} \\ \rho_{22} \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

Dans le cas dissipatif, les composantes réelles caractérisant l'état dynamique x du système contrôlé $\dot{x} = f(x, u)$ sont les composantes du vecteur de Bloch. d'après (1.40) et (1.41) du chapitre 1 :

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & 1 - x_3 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} \leq 1 \quad (4.24)$$

on obtient :

$$\begin{cases} x_1 = \rho_{12} + \rho_{21} \\ x_2 = i(\rho_{12} - \rho_{21}) \\ x_3 = \rho_{11} - \rho_{22} \end{cases} . \quad (4.25)$$

Et par suite, le système d'équation différentielle est :

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -\Gamma x_1 + u_2 x_3 \\ \dot{x}_2 = -\Gamma x_2 - u_1 x_3 \\ \dot{x}_3 = \gamma_- - \gamma_+ x_3 + u_1 x_2 - u_2 x_1 \end{cases} . \quad (4.26)$$

avec :

$$\gamma_+ = \gamma_{12} + \gamma_{21} \quad \text{et} \quad \gamma_- = \gamma_{12} - \gamma_{21} \quad (4.27)$$

qui doivent respecter certaines contraintes pour une dynamique acceptable : $\Gamma \geq \frac{\gamma_+}{2} \geq 0$ et $\gamma_- \in \mathbb{R}$ (voir (1.4.2)). Finalement, en terme de champ de vecteur, ce système s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Gamma x_1 \\ -\Gamma x_2 \\ \gamma_- - \gamma_+ x_3 \end{pmatrix} + u_1 \begin{pmatrix} 0 \\ -x_3 \\ x_2 \end{pmatrix} + u_2 \begin{pmatrix} x_3 \\ 0 \\ -x_1 \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

Chapitre 5

Synthèse Optimale en Temps Minimum d'un Système à 2 Niveaux

Ce chapitre constitue une première approche de la théorie du contrôle optimal. On va s'intéresser au problème en temps minimum d'un système quantique à 2 niveaux contrôlé par un unique champ. La dynamique quantique (équation de Lindblad) d'un tel système peut s'exprimer sous la forme d'une équation différentielle réelle contrôlée de dimension 2 :

$$\dot{x} = F + uG, \quad x \in \mathbb{R}^2. \quad (5.1)$$

La motivation de l'étude d'un tel système est double.

D'abord, puisque l'état x appartient à \mathbb{R}^2 , on a une description géométrique complète du problème de contrôle optimal dans le plan. On peut ainsi représenter et mettre en avant l'action des champs de vecteurs et les effets de la dissipation au travers de l'étude et du tracé de l'ensemble accessible et des trajectoires optimales.

Ensuite, il a été prouvé [122] qu'à partir d'une condition initiale x_0 donnée, on peut déterminer, pour un système de dimension 2 en temps minimum, l'ensemble des trajectoires optimales permettant d'atteindre toutes les cibles de l'ensemble accessible. Lorsqu'on détermine l'ensemble des trajectoires optimales où la condition finale n'est pas fixée, on dit que l'on effectue la *synthèse optimale* du problème.

Pour un problème en temps minimum, le PMP indique que le contrôle, nécessairement borné, appartient presque toujours à la frontière de son domaine U , excepté dans deux cas particuliers : l'un où il commute (cas bang-bang), l'autre où il est singulier (et appartient à l'intérieur du domaine U).

On peut alors montrer que la synthèse optimale est obtenue grâce à la détermination de certains lieux particuliers du plan, déterminés par la structure géométrique des champs de vecteurs F et G , qui sont tous, sous des conditions génériques, des arcs de courbes de dimension 1.

Ce chapitre est composé de trois sections. Dans une première section, on se place dans le cas général, et on rappelle un certain nombre de concepts permettant d'effectuer la synthèse optimale en temps minimum d'un système de dimension 2. En partant du PMP, on met en place divers objets mathématiques utiles pour l'étude de ce problème. La seconde section met en pratique ces concepts pour le cas du système quantique ouvert à 2 niveaux. On est amené à envisager des comportements dynamiques qualitativement différents selon les valeurs des paramètres de dissipation envisagés. Enfin, dans la dernière section, on présente les synthèses optimales obtenues.

Les sections 2 et 3 correspondent à l'article [3].

5.1 Etude Théorique de la Synthèse Optimale

L'étude théorique complète des systèmes de dimension 2 en temps minimum est effectuée dans le livre de Ugo Boscain et Benedetto Piccoli [122]. Pour cette classe de systèmes, les auteurs montrent l'existence d'une synthèse optimale sous certaines hypothèses dites génériques, et présentent alors un algorithme d'étude systématique. Cette première section reprend quelques résultats fondamentaux obtenus dans ce livre.

5.1.1 Application du Principe du Maximum

Dans cette première partie, on effectue la classification des extrémales en appliquant le PMP.

Soit le système optimal suivant :

$$\begin{cases} \dot{x} = F(x) + uG(x) & x \in \mathbb{R}^2 & |u| \leq 1 \\ x(0) = x_0 \\ \min_{|u| \leq 1} \int_0^T dt = T & \text{(avec T libre)} \end{cases} \quad (5.2)$$

où l'on décompose :

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad F(x) = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \quad G(x) = \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

On définit

$$X = F - G \quad \text{et} \quad Y = F + G \quad (5.4)$$

et on note K le commutateur de F et G , que l'on calcule de manière pratique avec :

$$K = [F, G] = \nabla G \cdot F - \nabla F \cdot G \quad (5.5)$$

où ∇F et ∇G sont deux matrices définies par :

$$\nabla F = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \nabla G = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

L'objectif est de réaliser la synthèse optimale du système (5.2), c'est-à-dire de déterminer les trajectoires menant la condition initiale x_0 à chacun des points de l'ensemble accessible en un temps minimum.

Afin d'appliquer le PMP, on introduit le co-vecteur $p = (p_1, p_2) \in \mathbb{R}^2$ et la constante négative λ pour définir la famille d'Hamiltonien (\mathcal{H}) :

$$\mathcal{H}(x, p, u, \lambda) = p \cdot F(x) + up \cdot G(x) + \lambda \quad (5.7)$$

où p et λ ne sont pas nuls en même temps. Le PMP donne les équations dynamiques des extrémales (x, p) contenant les optimales

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = F + uG \quad (5.8)$$

et

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -p \cdot (\nabla F + u\nabla G) \quad (5.9)$$

sous la condition de maximisation :

$$H(x, p) = \max_{|u| \leq 1} \mathcal{H}(x, p, u, \lambda). \quad (5.10)$$

Puisque le temps final T est libre, on a :

$$\mathcal{H}(x, p, u, \lambda) = p \cdot (F(x) + uG(x)) + \lambda = 0, \quad (5.11)$$

donc en utilisant le fait que $\lambda \leq 0$, on en déduit que :

$$p \cdot (F(x) + uG(x)) \geq 0. \quad (5.12)$$

Pour résoudre le problème de contrôle optimal, il faut maximiser \mathcal{H} . Pour ce faire, on définit la *fonction de commutation*

$$\Phi = p.G(x) \quad (5.13)$$

qui est une fonction continue dont l'étude des variations en fonction du temps indique quelle stratégie de contrôle appliquer pour satisfaire la condition de maximisation du PMP. En effet, la condition de maximisation porte uniquement sur cette fonction : maximiser \mathcal{H} est équivalent à maximiser $u\Phi$. On distingue alors deux cas selon les valeurs de la fonction Φ :

- si $\Phi \neq 0$, on est dans le cas *régulier*, et comme $|u| \leq 1$, le contrôle optimal est donné par $u = \text{sgn}(\Phi)$,
- si $\Phi = 0$, on est dans le cas *singulier* où la condition de maximisation ne permet pas de déterminer le contrôle optimal u . Dans ce cas où la fonction de commutation est nulle, on utilise sa dérivée par rapport au temps pour conclure. On peut vérifier que sa dérivée est

$$\dot{\Phi} = p.K(x), \quad (5.14)$$

et on doit à nouveau distinguer deux situations bien distinctes :

- si $\dot{\Phi} \neq 0$, alors la fonction Φ change de signe à l'instant $t = t_C$ appelé *temps de commutation*, et le contrôle u correspondant bascule alors de manière discontinue d'une valeur -1 à +1 si $\dot{\Phi}(t_C) > 0$, ou de +1 à -1 si $\dot{\Phi}(t_C) < 0$,
- si $\dot{\Phi} = 0$, alors la fonction Φ reste nulle sur un intervalle de temps dit *singulier*, et l'expression du contrôle singulier $u = u_S$ correspondant reste à déterminer.

En se basant sur les deux conditions nécessaires et suffisantes de singularité :

$$\Phi = p.G(x) = 0 \quad \text{et} \quad \dot{\Phi} = p.K(x) = 0, \quad (5.15)$$

on définit le *lieu de singularité*

$$C_B = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid \det(G, K) = 0\} \quad (5.16)$$

qui est le sous-ensemble de \mathbb{R}^2 (généralement de dimension 1) support des trajectoires singulières contrôlées par les contrôles $u = u_S$.

Dans le cas anormal où $\lambda = 0$, la condition (5.11) s'écrit :

$$\mathcal{H} = p.F + up.G = 0 \quad (5.17)$$

ainsi lorsque $\Phi = p.G = 0$, cette condition donne $p.F = 0$, et par suite les champs de vecteurs F et G sont colinéaires. On définit le *lieu de colinéarité*

$$C_A = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid \det(F, G) = 0\}, \quad (5.18)$$

qui est le sous-ensemble de \mathbb{R}^2 (généralement de dimension 1) où le commutateur K est nul.

Pour résumer, on distingue cinq types de comportements différents pour le champ de contrôle u qui sont complètement déterminés à l'aide de la fonction de commutation Φ :

Si $\Phi(t) < 0$, alors $u(t) = -1$ et la trajectoire correspondante est appelée *X-trajectoire*.
 Si $\Phi(t) > 0$, alors $u(t) = +1$ et la trajectoire correspondante est appelée *Y-trajectoire*.
 Si $\Phi(t_C) = 0$ et $\dot{\Phi}(t_C) > 0$, alors à l'instant t_C le contrôle commute de -1 à $+1$ et la trajectoire correspondante est la concaténation d'une X-trajectoire à laquelle succède une Y-trajectoire.
 Si $\Phi(t_C) = 0$ et $\dot{\Phi}(t_C) < 0$, alors à l'instant t_C le contrôle commute de $+1$ à -1 et la trajectoire correspondante est la concaténation d'une Y-trajectoire à laquelle succède une X-trajectoire.
 Si $\Phi(t) = 0$ et $\dot{\Phi}(t) = 0$, alors $u(t) = \varphi(t)$ est singulier et la trajectoire correspondante est appelée *Z-trajectoire*.

Remarque : Par définition, les X- et Y- trajectoires sont les trajectoires obtenues respectivement sous l'action des champs de vecteurs X et Y (5.4).

5.1.2 Le Cas Ordinaire

On dit qu'un point est ordinaire s'il n'appartient ni au lieu de singularité, ni au lieu de colinéarité, c'est-à-dire :

$$x \text{ est un point ordinaire} \iff x \notin C_B \cup C_A. \quad (5.19)$$

Par définition, une trajectoire extrémale se propageant dans une région de \mathbb{R}^2 ne contenant que des points ordinaires ne peut jamais être une Z-trajectoire. Elle peut être une X-trajectoire, une Y-trajectoire ou encore une concaténation de ces types de trajectoires résultant d'une commutation dans la séquence de contrôle. Or, parmi toute cette variété de trajectoires extrémales, seules certaines sont optimales et on a le résultat suivant :

Proposition 4 *Toute trajectoire optimale se propageant dans une région de points ordinaires est le résultat d'au plus une commutation. De plus, cette commutation est de type :*

$$\begin{aligned} -1 \text{ à } +1 \text{ si : } & \det(G, K) / \det(F, G) < 0 \\ +1 \text{ à } -1 \text{ si : } & \det(G, K) / \det(F, G) > 0. \end{aligned}$$

Démonstration : dans les régions ne contenant que des points ordinaires, les vecteurs F et G forment une base de l'espace \mathbb{R}^2 où l'on décompose leur commutateur K selon :

$$K = fF + gG. \quad (5.20)$$

où f et g sont des fonctions scalaires de x . Ceci implique :

$$\det(G, K) = \det(G, fF + gG) = f \det(G, F). \quad (5.21)$$

Maintenant si $\Phi = p.G = 0$, alors :

$$\dot{\Phi} = p.K = p.(fF + gG) = fp.F. \quad (5.22)$$

Or d'après le PMP, on a :

$$\mathcal{H} = p.F + \lambda = 0 \quad (5.23)$$

de sorte que $p.F$ est nécessairement positif ou nul. Mais puisque $p.G = 0$ et que F et G forment une base de \mathbb{R}^2 , alors $p.F$ ne peut pas être nul et par suite d'après (5.22) $\dot{\Phi}$ est du signe de f .

On considère à présent l'équation adjointe de l'équation (5.9) :

$$\dot{v} = (\nabla F + u\nabla G) \cdot v \quad (5.24)$$

dont la variable $v = \dot{x}$ est le champ de vecteur sur la variété \mathbb{R}^2 vérifiant à chaque instant :

$$pv = cste. \quad (5.25)$$

On détermine de manière unique le champ de vecteur v en imposant à chaque instant t l'égalité

$$v(t) = G(x(t)) \quad (5.26)$$

ce qui nécessite de réajuster la condition initiale $v(0)$, autrement dit $v(0)$ tel qu'il est défini est une fonction du temps t . On appelle w l'application qui à chaque instant t associe le vecteur vitesse initiale $v(0)$ permettant de satisfaire l'égalité (5.26)

$$w : \begin{cases} [0, T] \longrightarrow \mathbb{R}^2 \\ t \longmapsto w(t) = v(0) \end{cases} \quad (5.27)$$

Par définition de la fonction de commutation (5.13) et grâce à l'égalité (5.25), on a :

$$\Phi(t) = p(t)G(t) = p(0)w(t) \quad (5.28)$$

et on définit l'angle θ comme l'argument entre $G(0)$ et $w(t)$ (mesuré dans le sens trigonométrique)

$$\theta : \begin{cases} [0, T] \longrightarrow]-\pi, \pi] \\ t \longmapsto \theta(t) = \arg(G(0), w(t)) \end{cases} \quad (5.29)$$

qui est nul par définition en $t = 0$. La propriété fondamentale de l'angle θ , obtenue par un calcul direct, est

$$\operatorname{sgn}(\dot{\theta}) = \operatorname{sgn}(\det(G, K)) \quad (5.30)$$

5.1.3 Le Cas Singulier

On sait qu'en dehors du lieu de singularité, l'extrémale solution du PMP est obtenue par un contrôle $u = \pm 1$. Cependant, sur le lieu de singularité, le PMP ne permet pas d'explicitier l'expression du contrôle $u = u_S$. Pour déterminer ce contrôle singulier, on part du fait qu'au sein du lieu de singularité, les champs de vecteur vérifient $\det(G, K) = 0$, et donc

$$\frac{d}{dt} \det(G, K) = 0. \quad (5.31)$$

C'est cette relation (5.31) qui permet, de la même manière que le PMP dans le cas régulier, d'obtenir l'expression explicite de u_S , et un calcul direct montre que :

$$u_S = -\frac{\nabla \det(G, K) \cdot F}{\nabla \det(G, K) \cdot G} \quad (5.32)$$

où

$$\nabla \det(G, K) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} \det(G, K), \frac{\partial}{\partial x_2} \det(G, K) \right). \quad (5.33)$$

Soit $S \subset \mathcal{C}_S$ le support de dimension 1 d'une Z-trajectoire séparant un domaine ordinaire $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ en deux parties distinctes que l'on note Ω_X et Ω_Y selon les directions désignées par les champ de vecteurs X et Y et tel que pour tout $x \in S$:

- $\det(F(x), G(x)) \neq 0$ et $\det(G(x), K(x)) = 0$
- les champ de vecteurs $X(x)$ ou $Y(x)$ ne sont pas tangents à S .

En rappelant la définition de la fonction f conformément à (5.21) :

$$f = -\frac{\det(G, K)}{\det(F, G)}, \quad (5.34)$$

on dit que S est :

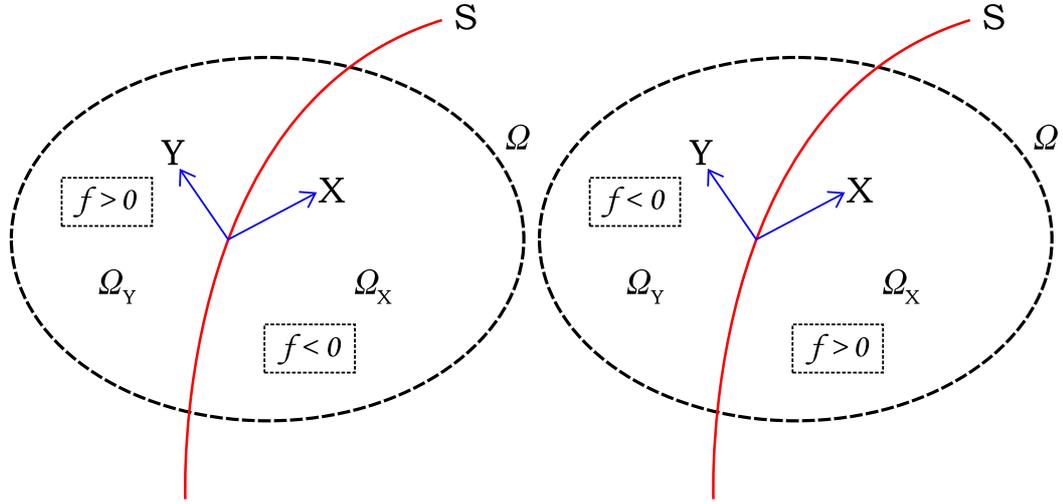


FIG. 5.1 – A gauche, le turnpike, à droite, l'antiturnpike

- *turnpike* si $f < 0$ sur Ω_X et $f > 0$ sur Ω_Y ,
- *antiturnpike* si $f > 0$ sur Ω_X et $f < 0$ sur Ω_Y .

Les résultats fondamentaux concernant les trajectoires singulières sont intimement liés aux turnpikes et antiturnpikes de la manière suivante :

- les turnpikes et les antiturnpikes sont des extrémales singulières engendrées par le contrôle singulier u_S (5.32),
- les antiturnpikes ne sont jamais optimales,
- toutes les optimales singulières sont contenues dans des turnpikes vérifiant $|u_S| < 1$.

Ces résultats indiquent que les seules extrémales singulières intéressantes (dans le sens où elles sont susceptibles d'être optimales) sont les Z -trajectoires ayant pour support un turnpike.

Pour montrer que les antiturnpikes ne sont pas optimales, on définit la 1-forme différentielle :

$$\omega : \begin{cases} \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R} \\ X = (x_1, x_2) \longmapsto \omega(X) = \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 \end{cases} \quad (5.35)$$

vérifiant les deux conditions :

$$\omega(F) = 1 \quad \text{et} \quad \omega(G) = 0. \quad (5.36)$$

Ces deux conditions (5.36) permettent de déterminer de manière unique la forme :

$$\omega_1 = \frac{g_2}{\det(F, G)} \quad \text{et} \quad \omega_2 = -\frac{g_1}{\det(F, G)} \quad (5.37)$$

qui, on le remarque, n'est pas définie lorsque $\det(F, G) = 0$, c'est-à-dire sur le lieu de colinéarité C_A . Si on intègre cette forme sur une trajectoire $\gamma : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^2$ solution de (5.8), compte tenu de (5.36) on a :

$$\int_{\gamma} \omega = \int_0^T \omega(\dot{x}) dt = \int_0^T \omega(F) dt + \int_0^T u \omega(G) dt = T \quad (5.38)$$

ce qui signifie que la 1-forme ω , appelée *forme horloge*, mesure le temps de parcours d'une trajectoire γ .

On peut calculer la différentielle $d\omega$ de cette forme, qui est une 2-forme définie sur $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$:

$$d\omega = \left(\frac{\partial \omega_2}{\partial x_1} - \frac{\partial \omega_1}{\partial x_2} \right) dx_1 \wedge dx_2 \quad (5.39)$$

où par définition :

$$dx_1 \wedge dx_2(X_1, X_2) = dx_1(X_1) dx_2(X_2) - dx_2(X_1) dx_1(X_2). \quad (5.40)$$

On obtient par un calcul direct :

$$d\omega = -\frac{f}{\det(F, G)} dx_1 \wedge dx_2 \quad (5.41)$$

et l'on remarque que $d\omega$ est nulle sur le lieu de singularité C_B . A présent, on suppose sans rien perdre à la généralité que $\det(F, G) > 0$, et on définit deux trajectoires ayant les mêmes points de départ x_0 et point d'arrivée x_1 . L'une, notée γ_S a pour support l'antiturnpike et a un temps de parcours T_S ; l'autre, notée γ_P possède un support exclusivement constitué de points ordinaires et a un temps de parcours T_P . Par définition de ω (5.36), qui comme son nom l'indique, mesure le temps de parcours :

$$\int_{\gamma_S} \omega = T_S \quad \text{et} \quad \int_{\gamma_P} \omega = T_P. \quad (5.42)$$

Si l'on considère le parcours fermé γ_S suivi de $-\gamma_P$ (voir figure 5.2), l'intégrale de chemin est donnée par :

$$\oint \omega = \int_{\gamma_S} \omega - \int_{\gamma_P} \omega = T_S - T_P. \quad (5.43)$$

Or, ce parcours fermé définit une surface Σ et d'après le théorème de Stokes et la formule (5.41), on a :

$$\oint \omega = \int_{\Sigma} d\omega = \int_{\Sigma} -\frac{f}{\det(F, G)} dx_1 dx_2 \quad (5.44)$$

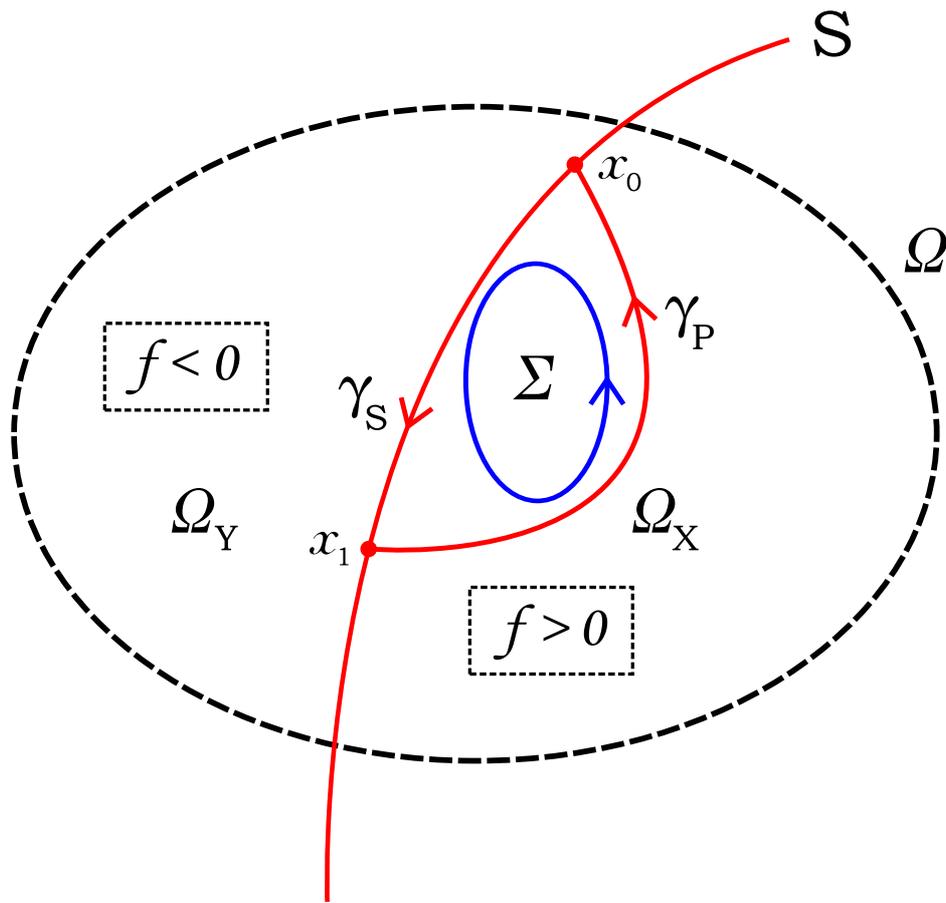


FIG. 5.2 – Cas antiturnpike où $\det(F, G) > 0$: la trajectoire γ_P met un temps inférieur à la trajectoire γ_S pour joindre les points x_0 à x_1

Puisque $\Sigma \subset \Omega_X$, on a $f > 0$, de plus par hypothèse $\det(F, G) < 0$, ce qui implique :

$$\oint \omega = T_S - T_P > 0 \quad (5.45)$$

Autrement dit, T_S est supérieur à T_P , et par suite T_S n'est pas optimale.

5.2 Application à un Système Dissipatif à 2 Niveaux

On étudie le système présenté en fin de chapitre 4 (4.28) dans le cas où $u_2 = 0$, ce qui revient à découpler x_1 de la dynamique et à se ramener dans le plan (x_2, x_3) :

$$\begin{cases} \dot{x}_2 = -\Gamma x_2 - u x_3 \\ \dot{x}_3 = \gamma_- - \gamma_+ x_3 + u x_2 \end{cases} \quad (5.46)$$

c'est-à-dire

$$F = \begin{pmatrix} -\Gamma x_2 \\ \gamma_- - \gamma_+ x_3 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad G = \begin{pmatrix} -x_3 \\ +x_2 \end{pmatrix}. \quad (5.47)$$

On peut alors calculer :

$$\nabla F = \begin{pmatrix} -\Gamma & 0 \\ 0 & -\gamma_+ \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \nabla G = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.48)$$

$$K = [F, G] = \nabla G \cdot F - \nabla F \cdot G = \begin{pmatrix} -\gamma_- + (\gamma_+ - \Gamma)x_3 \\ (\gamma_+ - \Gamma)x_2 \end{pmatrix}. \quad (5.49)$$

On considère quatre cas qualitativement différents :

- Cas (a) : Conversion d'un état pur en un état mélangé : $(\gamma_-/\gamma_+ = 0, \Gamma > \gamma_+ + 2)$.
- Cas (b) : Conversion d'un état pur en un état mélangé : $(\gamma_-/\gamma_+ = 0, \gamma_+ - 2 < \Gamma < \gamma_+ + 2)$.
- Cas (c) : Purification de l'état le plus mélangé, qui correspond au centre de la sphère de Bloch : $(\gamma_-/\gamma_+ = -1, \Gamma > \gamma_+ + 2)$.
- Cas (d) : Conversion d'un état pur en un état mélangé : $(\gamma_-/\gamma_+ = -0.5, \Gamma > \gamma_+ + 2)$.

Les valeurs numériques choisies pour les illustrations sont les suivantes : Table 5.1. Du choix de ces paramètres dépendent les caractéristiques des X- et Y-trajectoires et la structure des ensembles C_A et C_B .

TAB. 5.1 – Valeur numérique des taux de relaxations.

	Γ	γ_{12}	γ_{21}
(a)	3	0.3	0.3
(b)	1.5	0.3	0.3
(c)	3	0	1
(d)	3	0.1	0.3

5.2.1 Calcul des X- et Y- Trajectoires

Les X- et Y- trajectoires sont les solutions du système d'équations linéaires non homogène à coefficients constants suivant :

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Gamma & -u \\ u & -\gamma_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \gamma_- \end{pmatrix} \quad (5.50)$$

où $u = cste = \pm 1$. Compte tenu des cas que l'on envisage, on résout ces équations pour des conditions initiales de la forme $(0, k)^t$, où $k = 0$ ou 1 .

Ce type de système d'équations est trivialement soluble, et on a des solutions qualitativement différentes selon le signe du discriminant Δ qui est une fonction de Γ et γ_+ (voir figure 5.3)

$$\Delta = (\gamma_+ - \Gamma)^2 - 4. \quad (5.51)$$

On pose $\lambda = \frac{\Gamma + \gamma_+}{2}$, qui est une quantité toujours positive.

- Lorsque $\Delta > 0$, les solutions décroissent exponentiellement :

$$\begin{cases} x_2(t) = -\frac{2uk}{\sqrt{\Delta}} e^{-\lambda t} \sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2}t\right) \\ x_3(t) = \frac{k}{\sqrt{\Delta}} e^{-\lambda t} \left[\sqrt{\Delta} \cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2}t\right) + (\Gamma - \gamma_+) \sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2}t\right) \right] \end{cases} \cdot \quad (5.52)$$

- Lorsque $\Delta = 0$, les solutions décroissent exponentiellement :

$$\begin{cases} x_2(t) = -ukte^{-\lambda t} \\ x_3(t) = k[1 - (\gamma_+ + \lambda)t]e^{-\lambda t} \end{cases} \cdot \quad (5.53)$$

- Lorsque $\Delta < 0$, les solutions sont pseudo-périodiques :

$$\begin{cases} x_2(t) = -\frac{2uk}{\sqrt{-\Delta}} e^{-\lambda t} \sin\left(\frac{\sqrt{-\Delta}}{2}t\right) \\ x_3(t) = \frac{k}{\sqrt{-\Delta}} e^{-\lambda t} \left[\sqrt{-\Delta} \cos\left(\frac{\sqrt{-\Delta}}{2}t\right) + (\Gamma - \gamma_+) \sin\left(\frac{\sqrt{-\Delta}}{2}t\right) \right] \end{cases} \cdot \quad (5.54)$$

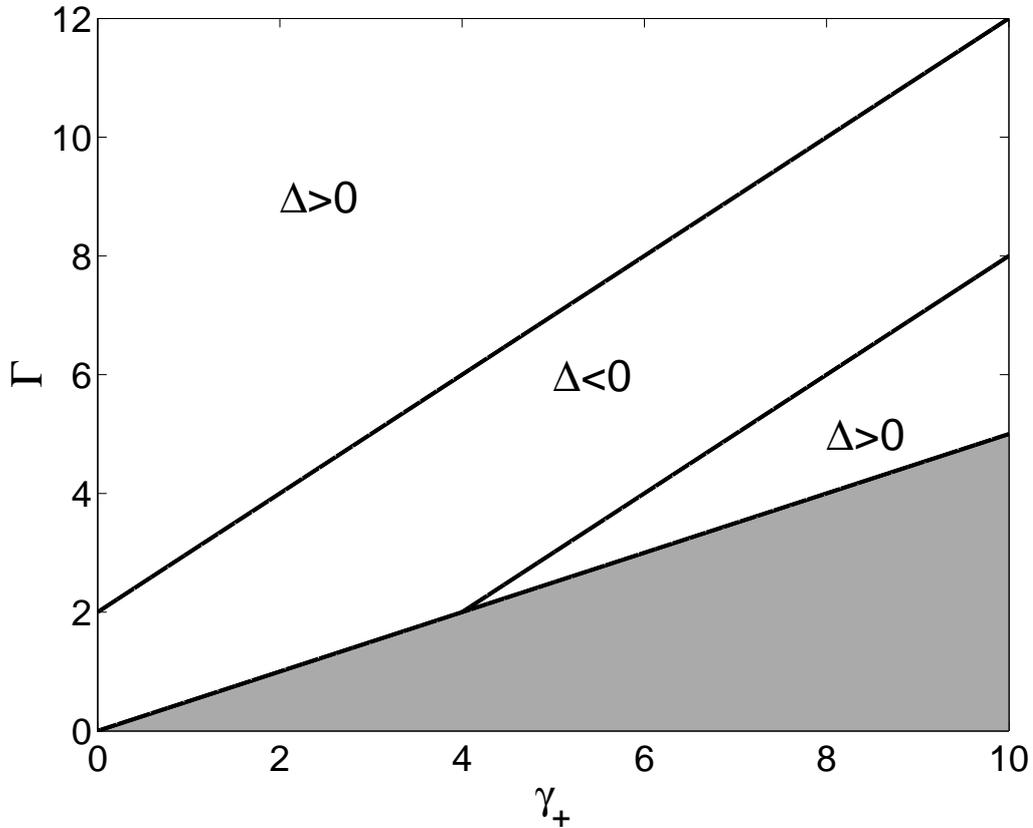


FIG. 5.3 – Signe du discriminant du système d'équation des X- et Y- trajectoires en fonction des valeurs de Γ et γ_+ . La région grisée n'est pas permise pour des dynamiques Linbladiennes

5.2.2 Courbes de Singularité et de Colinéarité

Ces deux ensembles sont responsables de modifications qualitatives du comportement des trajectoires optimales.

Pour déterminer C_B et C_A , on calcule :

$$\det(F, G) = -\Gamma x_2^2 - \gamma_+ x_3^2 + \gamma_- x_3 \quad (5.55)$$

et

$$\det(G, K) = 2(\Gamma - \gamma_+)x_2x_3 + \gamma_-x_2. \quad (5.56)$$

Si $\Gamma \neq \gamma_+$ alors l'ensemble C_B correspond à la réunion des deux courbes

$$x_2 = 0, \quad (5.57)$$

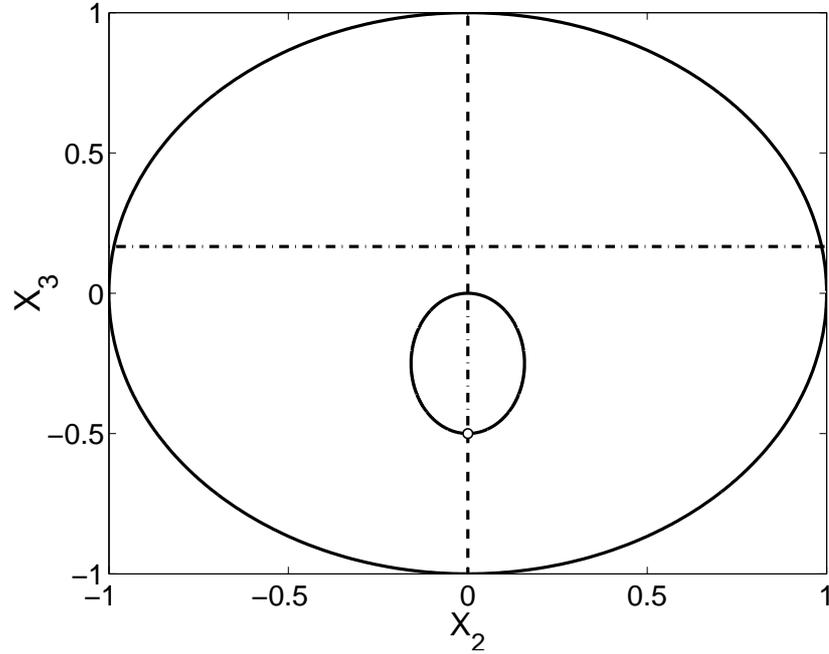


FIG. 5.4 – Les ensembles C_A (en trait plein) et C_B (en trait pointillé et en trait mixte) pour $\gamma_- \neq 0$. Les traits pointillés et mixtes représentent respectivement l'antiturnpike et le turnpike. Le cercle extérieur en trait plein indique la limite de la boule de Bloch dans le plan (x_2, x_3) . Le petit cercle indique la position du point fixe de la dynamique libre. Les valeurs numériques sont : $\Gamma = 1$, $\gamma_{12} = 0.1$ et $\gamma_{21} = 0.3$.

et

$$x_3 = \frac{-\gamma_-}{2\Gamma - 2\gamma_+}, \quad (5.58)$$

avec $|x_3| \leq 1$. Dans le cas où $\Gamma = \gamma_+$, C_B est seulement composée de la ligne verticale d'équation $x_2 = 0$. Les points (x_2, x_3) de la boule de Bloch solutions de l'équation polynômiale $\gamma_+ x_3^2 - \gamma_- x_3 - \Gamma x_2^2 = 0$ appartiennent à C_A . Dans le cas $\gamma_- \neq 0$, C_A est donc la réunion de deux paraboles. Cet ensemble est soit au dessus ou en dessous de la courbe $x_3 = \frac{-\gamma_-}{2\Gamma - 2\gamma_+}$ selon le signe de γ_- et de $\Gamma - \gamma_+$. Pour $\gamma_- = 0$, cet ensemble est réduit à l'origine de la boule de Bloch. La figure 5.4 montre la structure des ensembles C_A et C_B .

5.2.3 Ensemble Accessible

Les ensembles accessibles sont déterminés numériquement par construction de toutes les extrémales partant de la condition initiale (voir figure 5.5).

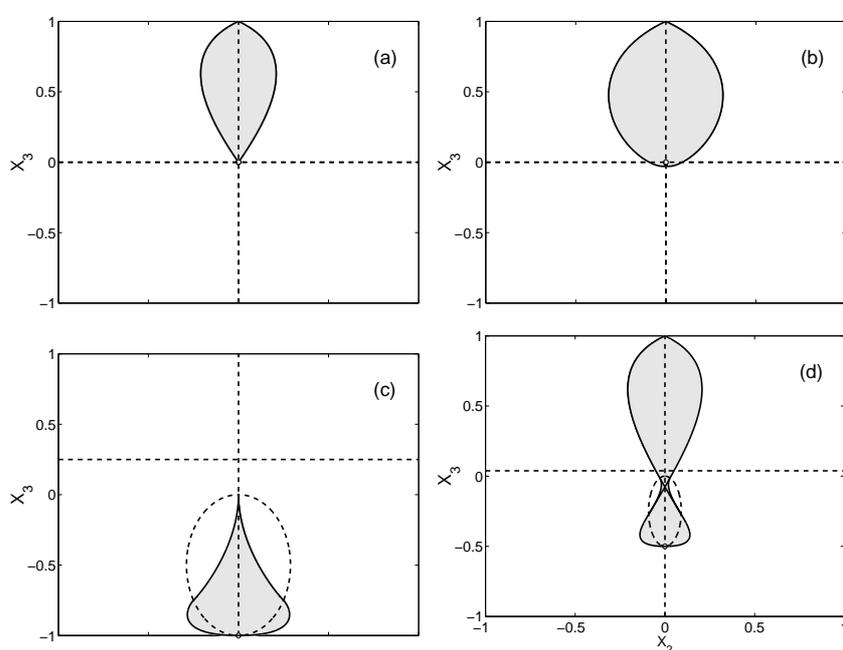


FIG. 5.5 – Ensembles accessibles (en gris) pour les différents cas (a), (b), (c) et (d). Les ensembles C_A et C_B sont représentés en trait pointillé. La position du point fixe de la dynamique libre est indiquée par un petit cercle.

5.3 Exemples de Synthèses Optimales

On peut à présent présenter les différentes synthèses optimales obtenues pour les différents cas.

Cas (a)

Dans le cas (a), les trajectoires optimales sont soit bang, soit bang-bang. Une trajectoire est dite *bang* si elle est associée au contrôle constant $u = +1$ ou $u = -1$. Une trajectoire *bang-bang* est la concaténation d'une $-X$ et d'une $-Y$ trajectoire. Par exemple, on note $X * Y$ une concaténation qui commence par une Y -trajectoire. Ici, le nombre maximum de commutation est égal à 1. L'élimination des extrémals non optimales a été effectuée grâce à la forme horloge ω et par symétrie par rapport à la droite du plan $x_2 = 0$. On rappelle que la forme horloge peut être utilisée seulement pour des trajectoires ne traversant pas le lieu de colinéarité C_A et dont le support appartient à l'un des cadrans dont les frontières sont déterminées par le lieu de singularité C_B . La figure 5.6 décrit la synthèse optimale pour ce problème ainsi que l'évolution de l'angle θ le long de la Y -trajectoire partant du point initial $(0, 1)^t$. La courbe de θ montre qu'une commutation est toujours permise le long d'une X - ou Y - trajectoire. On remarque que la forme de la courbe représentant θ est liée au signe de Δ . Plus précisément, si $\Gamma > \gamma_+ + 2$, alors θ est une fonction strictement décroissante ; et si $\Gamma < \gamma_+ - 2$ (ce qui n'est pas le cas traité ici), θ commence par croître pour atteindre un maximum lorsque la trajectoire traverse C_A puis décroît. Le cas intermédiaire où $\gamma_+ - 2 < \Gamma < \gamma_+ + 2$ est traité dans le cas (b). En utilisant la forme horloge, on peut montrer que seul une commutation est possible au sein d'un même cadran. Le reste de la synthèse optimale est déduite de la symétrie du problème. La droite $x_2 = 0$ est appelée courbe de recouvrement K car c'est un lieu particulier où chacun de ses points peut être atteint par deux trajectoires optimales différentes. On rappelle que le contrôle singulier sur la ligne verticale de C_A est donné par $u_S = 0$.

Cas (b)

La situation (b) est un peu plus riche que le cas (a). Pour $x_3 > 0$, la synthèse est identique au cas (a) : les trajectoires sont soit bang, soit bang-bang. La fonction θ est ici périodique, et les instants où $\dot{\theta}$ s'annule correspondent aux croisements de la trajectoire avec le lieu de singularité. Les propriétés de cette fonction indiquent que les X - et Y - trajectoires ne peuvent plus commuter une fois dans le second cadran qu'elles rencontrent. En effet, on

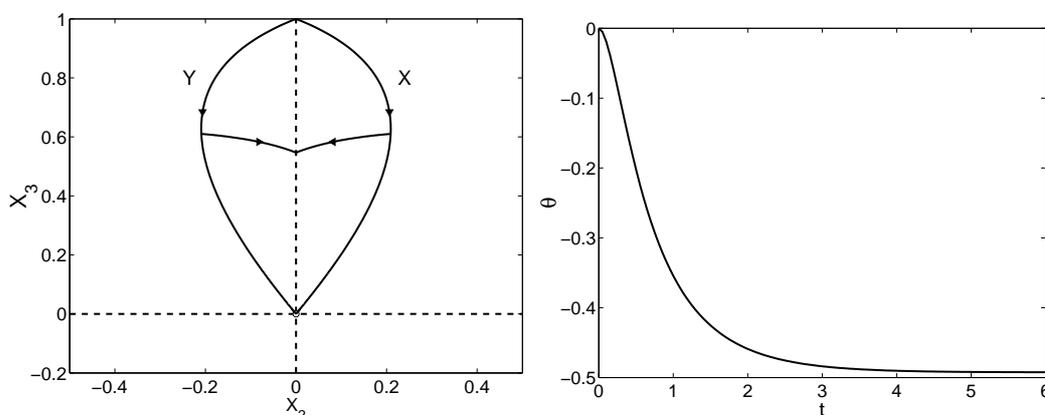


FIG. 5.6 – La figure de gauche représente la synthèse optimale pour le cas (a). Les lignes en pointillés indiquent le lieu de singularité C_B et le petit cercle le point fixe de la dynamique. A gauche est tracée l'évolution temporelle de θ pour une Y-trajectoire partant du point initial $(0, 1)^t$.

a alors $\dot{\theta}(t) > 0$ et $\theta(t) < 0$. Par symétrie par rapport à la droite $x_2 = 0$, on déduit que ces courbes sont optimales jusqu'à cette droite $x_2 = 0$. Le contrôle singulier le long de la ligne horizontale du lieu de singularité est optimal depuis le point d'intersection entre les X- et Y- trajectoires initiales et cette ligne. Puisque $\gamma_- = 0$, le contrôle singulier est donné par $u_S = 0$. A partir de cette ligne singulière, les trajectoires optimales, repartent sous le contrôle $u = \pm 1$. En utilisant la forme horloge ω , on peut montrer que ces trajectoires ne peuvent plus commuter de nouveau. Pour résumer, dans cette seconde partie, on a construit des trajectoires optimales de la forme $Y * Z * X$, $Y * Z * Y$, $X * Z * X$ et $X * Z * Y$. Cette synthèse optimale est représentée sur la figure 5.7. Ici, on peut voir que la dissipation seule (avec $u = 0$) accélère le contrôle pour atteindre un point voisinage de l'origine seulement le long de la direction horizontale et pour $x_3 = 0$. On montre sur la figure 5.8 un exemple de comparaison entre deux trajectoires extrémales. Le temps pour atteindre respectivement les points A et B depuis la condition initiale $(0, 1)^t$ par des X- et Y- trajectoires est le même. On souhaite atteindre le point C depuis A ou B . En partant de B , on utilise une X-trajectoire, tandis qu'en partant de A , il faut suivre une concaténation $Y * Z$. La forme horloge ne peut être utilisée puisque les trajectoires n'appartiennent pas au même cadran. On considère alors l'image AD symétrique de la trajectoire BD par rapport à l'axe $x_3 = 0$. Les deux extrémales sont alors dans le même cadran et la forme ω peut être utilisée pour conclure que la courbe $Y * Z * Y$ est optimale pour atteindre le point C .

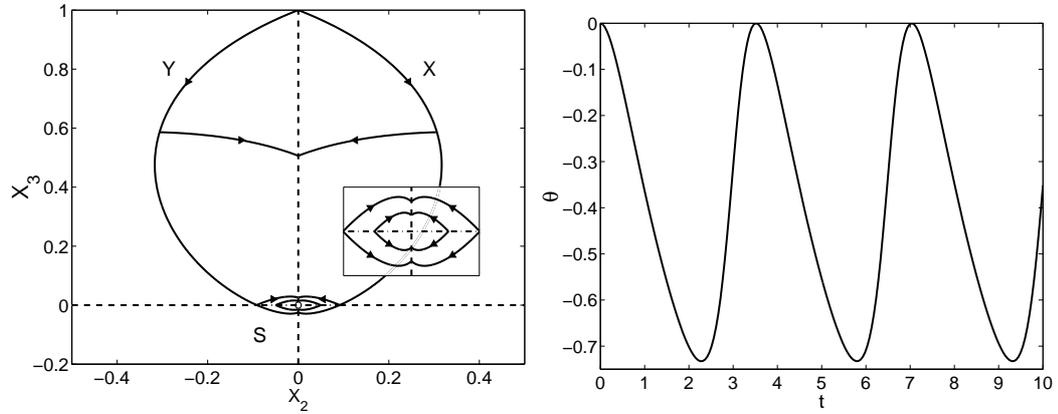


FIG. 5.7 – Mêmes courbes que sur la figure 5.6, mais dans le cas (b). La ligne en trait mixte représente la trajectoire singulière S . Le petit encadré est un agrandissement de la synthèse optimale au voisinage de l'origine.

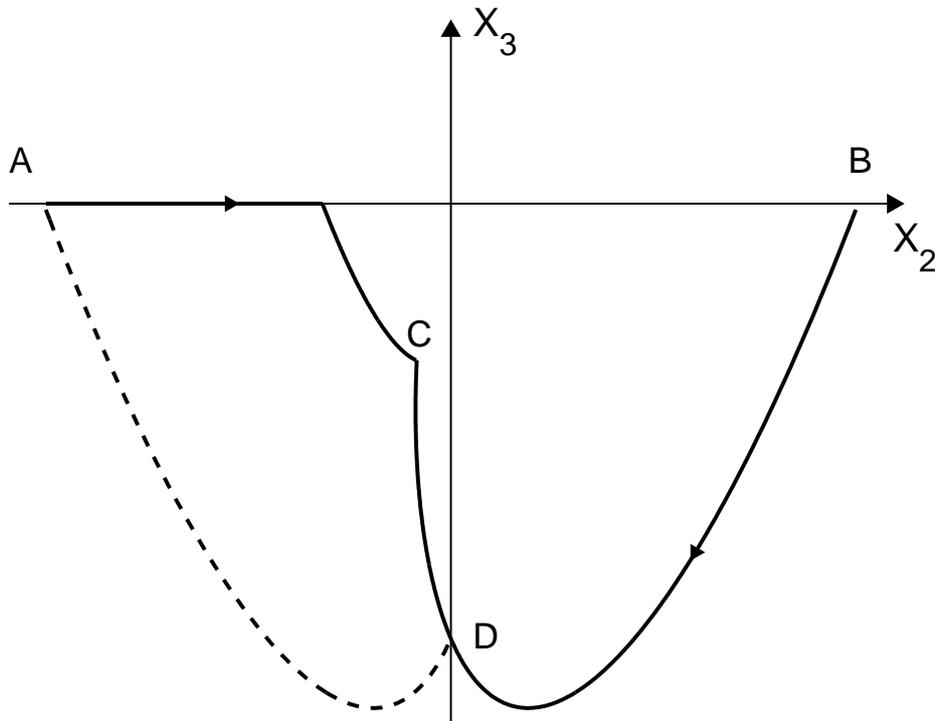


FIG. 5.8 – Utilisation de la symétrie pour déterminer les trajectoires optimales (voir texte).

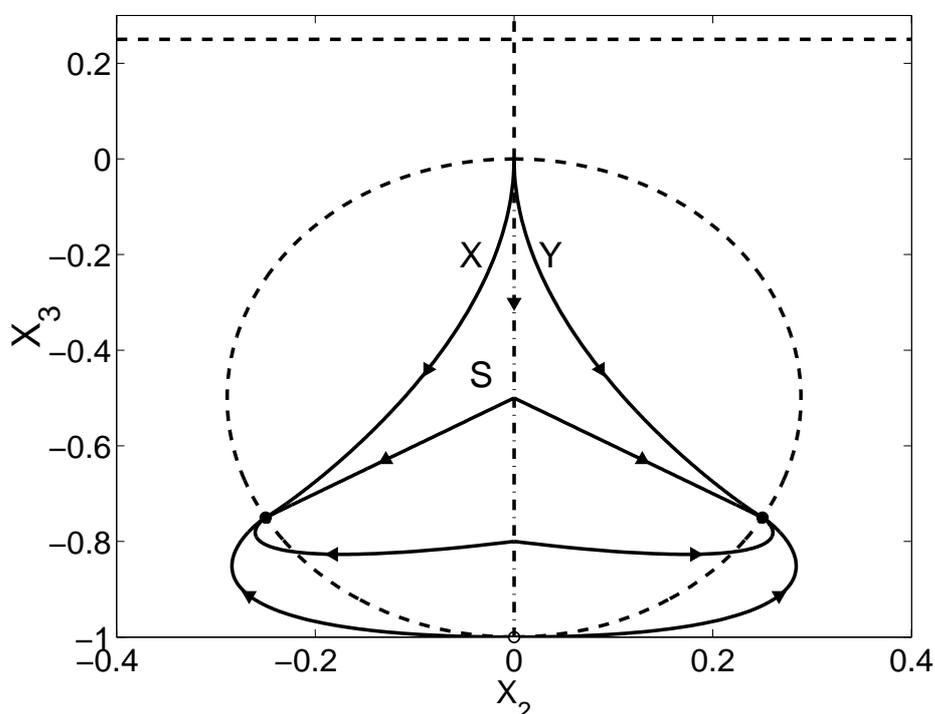


FIG. 5.9 – Même courbe que sur la figure 5.6, mais dans le cas (c).

Cas (c)

Dans ce cas, la ligne singulière $x_3 = 0$ est optimale. Le contrôle singulier correspondant est nul. Des commutations peuvent être envisagées pour des trajectoires initialement de type $-X$ ou $-Y$, mais elles ne conduisent pas à des trajectoires optimales. Par contre, les trajectoires bang partant de S sont optimales. Quand deux extrémals croisent le lieu de colinéarité, une étude faisant intervenir ω ne peut être envisagée et une comparaison numérique directe est alors utilisée. Dans ce cas, la fonction θ indique que ces courbes ne doivent pas commuter pour rester optimales. On remarque pour terminer que la dissipation a un effet bénéfique pour le contrôle et diminue le temps de purification du système. Les trajectoires optimales sont de type $X-$, $Y-$, $X * Z$ ou $Y * Z$. La figure 5.9 présente la synthèse optimale dans ce cas.

Cas (d)

Le cas (d) est le plus complexe et correspond à la composition des cas (b) et (c). La difficulté tient dans la structure globale du contrôle, c'est-à-dire dans la manière de procéder pour recomposer les deux analyses précédentes. Pour $x_3 > 0$, la synthèse optimale est similaire aux cas (a) et (b), avec

des trajectoires bang ou bang-bang. Le bas de la synthèse optimale depuis le point d'intersection des X- et Y- trajectoires initiales est identique au cas (c).

On décrit maintenant la partie centrale de la synthèse. la ligne horizontale du lieu de singularité ne correspond pas à une trajectoire singulière car le contrôle singulier calculé est non admissible : il vérifie $|u_S| > 1$. On considère le premier point d'intersection de C_A avec les X- et Y- trajectoires. On sait qu'une courbe de commutation C part de ce point. Pour déterminer le lieu exact de C , on utilise le fait que la fonction θ est identique (modulo π) entre deux instants de commutation successifs. Ce résultat permet de construire C numériquement. Par définition, toute optimale atteignant un point de la courbe de commutation C doit obligatoirement commuter à cet instant sous peine de perdre son optimalité. On remarque que les courbes C , C_A et C_B se coupent à l'origine. Puisque la ligne $x_2 = 0$ est turnpike pour $\frac{\gamma_-}{\gamma_+} < x_3 < 0$, il faut se demander si une trajectoire singulière suivant ce support est optimale, c'est-à-dire si une synthèse optimale du type présentée en figure 5.11 peut avoir lieu. Pour répondre à cette question on utilise la fonction de commutation Φ . Pour $x(t) \in C \cup S$, $\Phi(t) = 0$, c'est-à-dire que les vecteurs $p(t)$ et $G(x(t))$ sont orthogonaux. Puisque la direction orthoradiale de G est connue, on peut en déduire la direction de p . Soit z_1 et z_2 deux points appartenant respectivement à C et S . Les champs de vecteur $G(z)$ associés à ces points sont représentés schématiquement sur la figure 5.11. On souhaite conduire les états représentés par z_1 et z_2 à l'origine en déterminant les directions des co-états. On rappelle que d'après le PMP, p est une fonction continue jamais nulle. Quand z_1 va à l'origine, on déduit par la continuité de p que p_1 est vertical à l'origine. Quand z_2 va à l'origine, la direction limite de p_2 est donnée par la courbe de commutation C . Pour respecter la continuité de p , on déduit que C doit être tangent à la droite $x_2 = 0$ à l'origine. Les lignes singulières pour $x_3 < 0$ ne sont donc pas optimales. Les trajectoires de type $Y * X * Y$ ou $X * Y * X$ sont optimales jusqu'à $x_3 = 0$. De plus, quand une X- ou Y- trajectoire initiale atteint le lieu de colinéarité, l'angle entre les vecteurs F et G change de signe. De nouvelles trajectoires partant de ce point d'intersection correspondent à deux nouvelles régions de l'ensemble accessible.

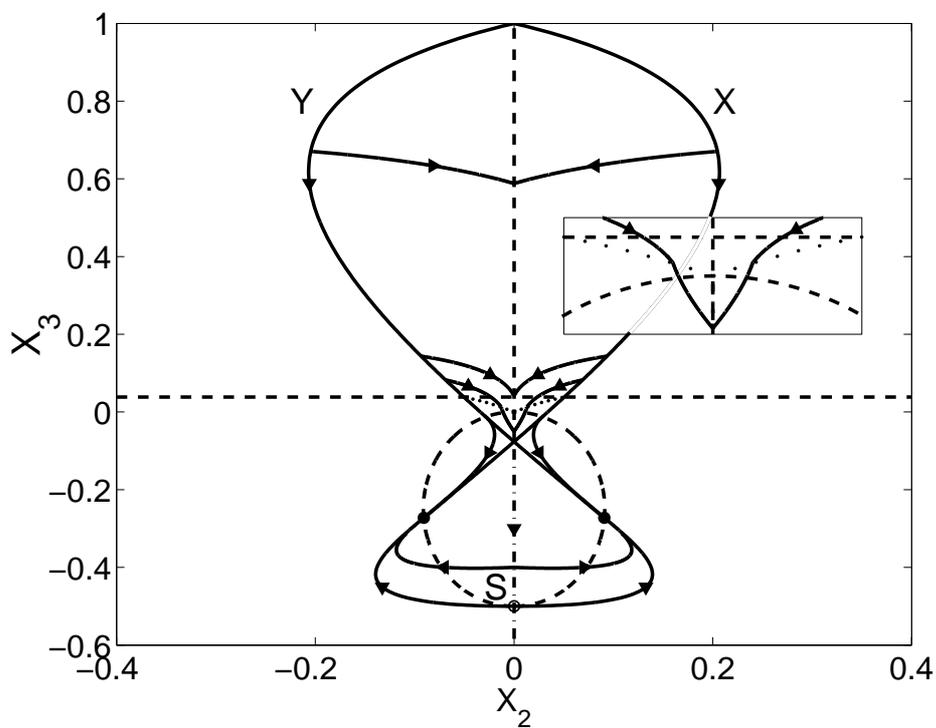


FIG. 5.10 – Même courbe que sur la figure 5.6, mais dans le cas (d). Le trait mixte correspond à la courbe de commutation C .

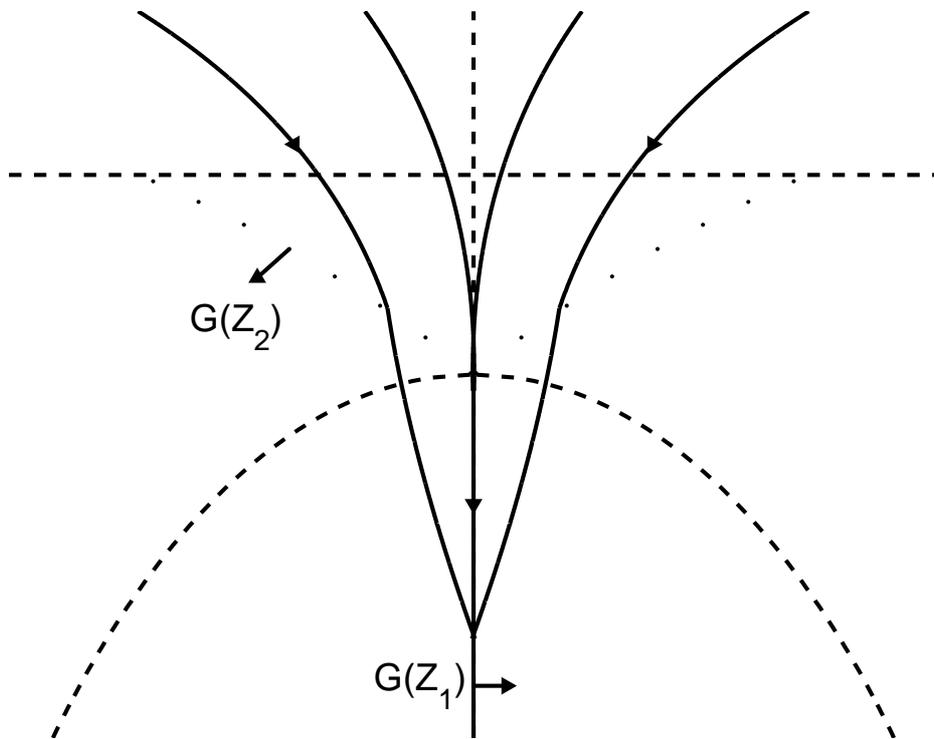


FIG. 5.11 – Synthèse optimale possible autour de l'origine.

Chapitre 6

Contrôle Optimal Assisté d'une Mesure

Soit un système quantique à N niveaux fermé et contrôlé par un champ laser externe tel que sa dynamique ne soit pas complètement contrôlable. Autrement dit, pour un état initial $|\psi_i\rangle$ donné, il existe un sous-ensemble $\mathcal{G}_{|\psi_i\rangle} \subset \mathcal{H}$ d'états non accessibles via l'évolution unitaire engendrée par l'équation de Schrödinger, et ce quel que soit le champ de contrôle $u(t)$ appliqué. Cependant, on peut envisager d'autres transformations sur le système de type non-unitaire qui permettraient d'atteindre certains états de $\mathcal{G}_{|\psi_i\rangle}$. Le processus de mesure de von Neumann [53] en tant que projecteur est un exemple de ce type de transformation. L'utilisation d'une mesure pour conduire l'évolution d'un système a été discutée dans une série de travaux [125, 126, 127, 128, 129, 130], principalement d'un point de vue numérique. Dans le cas d'un système quantique contrôlé, il a été montré en particulier que le processus de mesure peut modifier les caractéristiques du champ laser optimal. Il a été également montré qu'un système quantique non complètement contrôlable le devient sous l'action de mesures de von Neumann adéquates [131]. Dans ce chapitre, on étudie le contrôle optimal en temps et en énergie minimale d'un système à 3 niveaux équidistants dont seuls les états plus proches voisins sont couplés. Un tel système n'est pas complètement contrôlable et on se propose de décrire plusieurs stratégies de contrôle au cours desquelles le processus de mesure joue un rôle déterminant.

Ce dernier chapitre est découpé en trois sections. Dans la première section, on présente la dynamique du système modèle que l'on étudie, qui n'est pas complètement contrôlable, car découplé en deux sous-systèmes identiques en raison de sa symétrie particulière. Puis on décrit le processus de mesure que l'on effectue sur lui. Dans la seconde section, on présente la résolution du pro-

blème de contrôle optimal au sein de chaque sous-système, qui correspond au problème de Grushin sur la sphère. Enfin, dans la dernière section, on étudie différentes situations de contrôle optimal faisant intervenir le processus de mesure.

Ce chapitre correspond à l'article [4].

6.1 Description du Processus

On étudie les états purs d'un système quantique fermé à 3 niveaux équidistants. Un tel système est décrit par un vecteur d'état normé $|\Psi\rangle \in \mathbb{C}^3$ dont l'évolution temporelle est déterminée par l'équation de Schrödinger contrôlée :

$$i \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle \quad (6.1)$$

où en représentation d'interaction, l'Hamiltonien contrôlé $H(t)$ s'écrit :

$$H(t) = \begin{pmatrix} 0 & u_1(t) + iu_2(t) & 0 \\ u_1(t) - iu_2(t) & 0 & u_1(t) + iu_2(t) \\ 0 & u_1(t) - iu_2(t) & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

En s'appuyant sur le résultat du chapitre 4 (4.22), cette dynamique est équivalente à celle du système contrôlé affine et sans dérive

$$\dot{x} = u_1 F_1(x) + u_2 F_2(x) \quad (6.3)$$

où le vecteur x de dimension 6 vérifie la condition de normalisation

$$\|x\| = \sum_{i=1}^6 x_i^2 = 1, \quad (6.4)$$

et où les champs de vecteurs F_1 et F_2 définis sur \mathbb{R}^6 sont donnés par

$$F_1(x) = \begin{pmatrix} x_4 \\ -x_3 \\ x_2 + x_6 \\ -(x_1 + x_5) \\ x_4 \\ -x_3 \end{pmatrix}, \quad F_2(x) = \begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \\ x_5 - x_1 \\ x_6 - x_2 \\ -x_3 \\ -x_4 \end{pmatrix}. \quad (6.5)$$

6.1.1 Représentation des Etats et Contrôlabilité

On définit à présent un nouveau système de coordonnées $\{X_i\}$:

$$\begin{cases} X_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 + x_6) \\ X_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_5) \\ X_3 = -x_3 \\ X_4 = -x_4 \\ X_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_5) \\ X_6 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_6) \end{cases} \quad (6.6)$$

qui vérifie aussi la condition de normalisation : $\|X\| = \sum_{i=1}^6 X_i^2 = 1$. Dans le nouveau système de coordonnées $\{X_i\}$ l'équation de Schrödinger contrôlée s'écrit sous la forme matricielle suivante :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \dot{X}_1 \\ \dot{X}_3 \\ \dot{X}_5 \\ \dot{X}_2 \\ \dot{X}_4 \\ \dot{X}_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -u_1 & 0 & u_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -u_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -u_1 & 0 & u_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -u_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_3 \\ X_5 \\ X_2 \\ X_4 \\ X_6 \end{pmatrix}. \quad (6.7)$$

Ainsi, le système que l'on étudie initialement sur \mathbb{S}^5 se décompose en deux sous-systèmes $\{X_1, X_3, X_5\}$ et $\{X_2, X_4, X_6\}$ découplés et de dynamiques équivalentes. De plus, un calcul direct montre que les deux quantités dynamiques

$$\begin{cases} R_1^2 = X_1^2 + X_3^2 + X_5^2 \\ R_2^2 = X_2^2 + X_4^2 + X_6^2 \end{cases} \quad (6.8)$$

sont deux constantes du mouvement, et la relation de normalisation $\|X\|^2 = 1$ se réécrit

$$\|X\|^2 = R_1^2 + R_2^2 = 1 \quad (6.9)$$

On a ainsi deux constantes du mouvement R_1 et R_2 pour le système que l'on étudie. Les états du système sont dorénavant représentés par deux points appartenant à deux sphères distinctes, notées S_1 et S_2 et de rayons respectifs R_1 et R_2 . A partir de là, on peut dégager deux familles d'états bien particuliers. La première est définie lorsque $R_1 = 1$ (et donc $R_2 = 0$). De tels états sont à chaque instant de la forme $X = (X_1, 0, X_3, 0, X_5, 0)^t$ puisque leur dynamique au sein du sous-espace S_2 est toujours nulle. Pour cette raison, ils sont complètement représentés par un point de la sphère S_1 de rayon 1

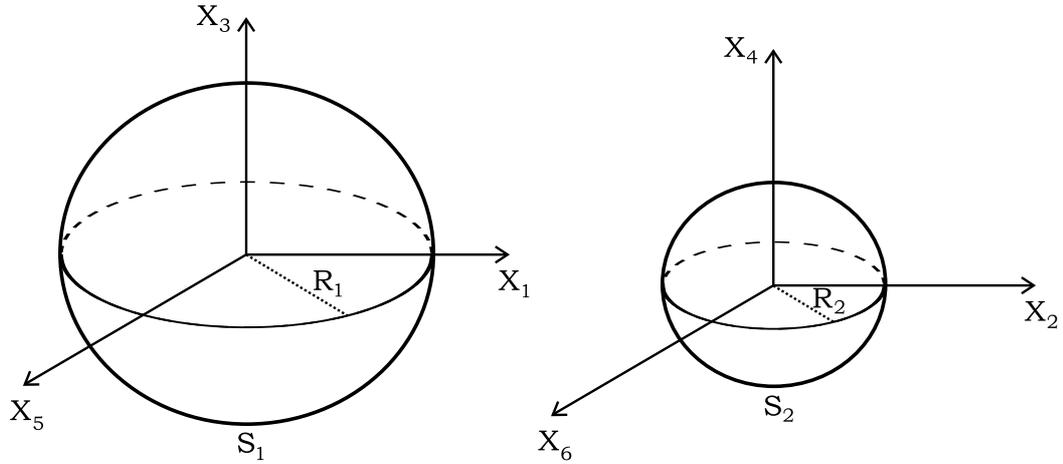


FIG. 6.1 – Représentation des états dynamiques du système sur deux sphères dont les rayons vérifient $R_1^2 + R_2^2 = 1$. Les états initiaux sont définis par $R_1 = 1$, et les états cibles par $R_2 = 1$

appelée S_i . Par abus de langage, on dit qu'un point « appartient à la sphère S_i » s'il appartient à cette famille. De manière similaire, on définit la seconde famille d'états par $R_2 = 1$ (et $R_1 = 0$) et par les mêmes arguments que ceux énoncés précédemment, on déduit que ces états sont complètement décrits sur la sphère S_2 de rayon 1 appelée S_f . Un tel point est dit « appartenant à S_f ». La dynamique du système n'est pas complètement contrôlable : on ne peut jamais atteindre un état cible appartenant à la sphère S_f en partant d'un état initial appartenant à la sphère S_i .

6.1.2 Mesure et Définition du Coût

Dans cette partie, on rappelle brièvement ce qu'est une mesure en mécanique quantique et on explique comment ce processus permet de contrôler le problème qu'on s'est posé : atteindre une cible sur S_f en partant d'un état de S_i . Puis, après avoir décrit la stratégie de contrôle mise en jeu dans sa globalité, on donne la définition totale du coût à minimiser.

La notion de mesure est un problème délicat et encore ouvert en mécanique quantique, c'est pour cette raison qu'on se restreint à une définition basique. Dans le cadre du problème considéré, on considère une observable \mathcal{Q} admettant la décomposition spectrale non dégénérée

$$\mathcal{Q} = \sum_{k=1}^3 q_k |\Phi_k\rangle \langle \Phi_k| \quad (6.10)$$

où par définition les valeurs propres distinctes q_k sont toutes réelles et l'ensemble $\{|\Phi_k\rangle\}$ forme une base orthonormée de l'espace de Hilbert \mathbb{C}^3 . Par suite, un état pur du système peut se décomposer sur cette base selon :

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^3 a_k |\Phi_k\rangle. \quad (6.11)$$

D'après le principe de réduction du paquet d'onde, un système dans l'état (6.11) sur lequel on effectue une mesure correspondant à l'observable (6.10) est *instantanément projeté* avec la probabilité $|a_p|^2$ dans l'état propre $|\Phi_p\rangle$ ¹. Maintenant, si les trois états propres de l'observable considérée appartiennent tous à la sphère S_f , on est alors assuré, même si on ne peut pas prédire précisément sur quel état on se trouvera post-mesure, d'être dans un état sur la sphère S_f . On vient ainsi de dégager la caractéristique fondamentale d'une mesure permettant de franchir la barrière de la non contrôlabilité : l'ensemble de ses vecteurs propres doit nécessairement appartenir à la sphère S_f .

A partir de là, on peut décrire complètement la stratégie de contrôle envisagée. Elle se déroule en 3 étapes successives.

1. A l'instant $t = 0$, on part d'un état initial $|\Psi_0\rangle$ appartenant à la sphère S_i et on suit une trajectoire optimale déterminée par le PMP sur la sphère S_i pour atteindre l'état $|\Psi_1\rangle$ à l'instant $t = t_M$.
2. On effectue la mesure. Juste après celle-ci, l'état du système se trouve dans l'un des trois états propres appartenant à S_f de l'observable $|\Phi_k\rangle$.
3. Selon l'état dans lequel on se trouve post-mesure, on applique un champ de contrôle optimal permettant de propager sur la sphère S_f l'état $|\Phi_k\rangle$ jusqu'à la cible $|\Psi_2\rangle$.

Remarque 1 : on n'envisage pas en réalité une seule, mais trois stratégies de contrôle, chacune d'elle correspond à une des trois différentes issues possibles de la mesure et est associée à une certaine probabilité d'occurrence.

Remarque 2 : Le rôle du paramètre t_M est fondamental ici. En effet, il donne quel état $|\Psi_1\rangle$ sur la trajectoire optimale partant de $|\Psi_0\rangle$ est mesuré. Or, cet état sur lequel on effectue la mesure détermine la distribution de probabilité d'obtention des états propres de l'observable. Qualitativement, on peut concevoir que plus une trajectoire optimale sur S_f liant un état propre à l'état cible coûte cher, plus il est judicieux de chercher à minimiser sa probabilité

¹attendu que $\sum_{k=1}^3 |a_k|^2 = 1$, les nombres positifs $\{|a_k|^2\}$ constituent la distribution de probabilité de projection sur les états propres $\{|\Phi_k\rangle\}$ de l'observable

d'occurrence.

Remarque 3 : On effectue implicitement l'hypothèse que le résultat de la mesure q_p est lu de sorte qu'on sait immédiatement quel champ de contrôle appliquer à l'issue de la mesure².

Compte tenu de la description du processus et des différentes remarques qui viennent d'être effectuées, on est en mesure de donner une définition du coût. On appelle c_0 le coût de la trajectoire sur S_i liant $|\Psi_0\rangle$ à $|\Psi_1\rangle$, et c_1 , c_2 et c_3 les coûts des trajectoires sur S_f liants respectivement $|\Phi_1\rangle$, $|\Phi_2\rangle$ et $|\Phi_3\rangle$ à $|\Psi_2\rangle$. Etant donné l'ingrédient probabiliste du processus proposé (l'état issu de la mesure), il faut envisager un coût de nature statistique, c'est-à-dire qui s'interprète sur un grand nombre de séquences. Une définition naturelle est la suivante :

$$c = c_0 + \sum_{k=1}^3 |a_k|^2 c_k \quad (6.12)$$

où le terme $\sum_{k=1}^3 |a_k|^2 c_k$ est la valeur moyenne du coût liant l'état propre résultant de la mesure à la cible.

On va s'intéresser à minimiser le temps ou l'énergie. Dans la section qui suit, on détermine les extrémales sur S_i et S_f , autrement dit on explicite les solutions optimales des étapes 1 et 3 du processus.

6.2 Le Modèle de Grushin sur la Sphère

Le modèle de Grushin sur la sphère [132] est le système contrôlé de dimension 3 suivant :

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \end{pmatrix} = u_1 F_1 + u_2 F_2 = u_1 \begin{pmatrix} x_2 \\ -x_1 \\ 0 \end{pmatrix} + u_2 \begin{pmatrix} 0 \\ x_3 \\ -x_2 \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

où l'état du système vérifie la contrainte $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$, c'est-à-dire que l'espace des états est la sphère \mathbb{S}^2 . On s'intéresse à minimiser l'énergie, c'est-à-dire le coût quadratique $u_1^2 + u_2^2$. Pour cela, on passe naturellement en

²on a conscience de la difficulté conceptuelle que pose cette hypothèse puisqu'en effet lire la mesure et agir en conséquence réclame un certain temps, il ne faut voir ici qu'une simplification quitte à l'abandonner ensuite pour décrire des procédés plus réalistes

coordonnées sphériques (r, θ, φ) avec $r = 1$, $\theta \in [0, \pi]$ et $\varphi \in [0, 2\pi]$:

$$\begin{cases} x_1 = \sin \theta \sin \varphi \\ x_2 = \cos \theta \\ x_3 = \sin \theta \cos \varphi \end{cases} \quad (6.14)$$

où les vecteurs de base de l'espace tangent se transforment selon

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_1} = \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} = -\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} = \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{cases} \quad (6.15)$$

Ainsi, en coordonnées sphériques, les champs de vecteurs F_1 et F_2 se transforment selon

$$\begin{cases} F_1 = x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} = \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ F_2 = x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} = -\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{cases} \quad (6.16)$$

de sorte que le système initial (6.13) soit équivalent au système

$$\begin{pmatrix} \dot{\theta} \\ \dot{\varphi} \end{pmatrix} = u_1 \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ \cos \varphi \cot \theta \end{pmatrix} + u_2 \begin{pmatrix} -\cos \varphi \\ \sin \varphi \cot \theta \end{pmatrix}. \quad (6.17)$$

En utilisant la rotation sur le contrôle

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \varphi & -\cos \varphi \\ \cos \varphi & \sin \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad (6.18)$$

qui ne modifie pas le coût ($v_1^2 + v_2^2 = u_1^2 + u_2^2$), on obtient finalement le système contrôlé suivant

$$\begin{pmatrix} \dot{\theta} \\ \dot{\varphi} \end{pmatrix} = v_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + v_2 \begin{pmatrix} 0 \\ \cot \theta \end{pmatrix}. \quad (6.19)$$

Ces préliminaires étant effectués, on peut à présent appliquer le PMP. Pour cela, on introduit le co-état $p = (p_\theta \ p_\varphi)$ qui permet de définir l'Hamiltonien (normé à $-\frac{1}{2}$)

$$\mathcal{H} = v_1 p_\theta + v_2 p_\varphi \cot(\theta) - \frac{1}{2}(v_1^2 + v_2^2) \quad (6.20)$$

La condition de maximisation de l'Hamiltonien (6.20) sur $v = (v_1, v_2)$ dépourvu de contraintes devient

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_1} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_2} = 0 \quad (6.21)$$

ce qui conduit à l'expression du contrôle optimal :

$$v_1 = p_\theta \quad \text{et} \quad v_2 = p_\varphi \cot(\theta). \quad (6.22)$$

En injectant (6.22) dans (6.20), on déduit l'Hamiltonien maximisé sur v

$$H(x, p) = \frac{1}{2}(p_\theta^2 + p_\varphi^2 \cot^2 \theta) \quad (6.23)$$

dont les trajectoires extrémales associées obéissent à

$$\begin{cases} \dot{\theta} &= p_\theta \\ \dot{\varphi} &= p_\varphi \cot^2 \theta \\ \dot{p}_\theta &= p_\varphi^2 \cot \theta (1 + \cot^2 \theta) \\ \dot{p}_\varphi &= 0 \end{cases} \quad (6.24)$$

Puisque p_φ est une constante du mouvement, notée J , en involution avec H , les équations sont intégrables au sens de Liouville. La partie qui suit est l'intégration par quadrature du système (6.24) et est donc purement technique. Tout d'abord, on note $(\theta^0, \varphi^0, p_\theta^0, p_\varphi^0)$ l'état initial du système. On cherche principalement à obtenir une expression liant θ à ϕ car c'est dans ce plan que les trajectoires optimales seront représentées. On part de l'expression (6.23) de l'Hamiltonien H , pour établir :

$$p_\theta^2 = 2H \left[1 - \frac{J^2}{2H} \cot^2 \theta \right]. \quad (6.25)$$

En posant $M = J^2/2H$, on peut vérifier par un calcul direct que l'on a :

$$p_\theta^2 = 2H \left[\frac{1 - (M+1) \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} \right]. \quad (6.26)$$

A l'aide de cette dernière expression on obtient :

$$\frac{d\theta}{dt} = p_\theta = \pm \frac{\sqrt{2H}}{\sin \theta} \sqrt{1 - (M+1) \cos^2 \theta}. \quad (6.27)$$

C'est-à-dire qu'on a l'égalité

$$dt = \pm \frac{1}{\sqrt{2H}} \frac{\sin \theta d\theta}{\sqrt{1 - (M+1) \cos^2 \theta}} \quad (6.28)$$

que l'on est capable d'intégrer membre à membre ³ entre les instants 0 et t pour obtenir l'égalité

$$t = \mp \frac{1}{\sqrt{2H(M+1)}} [\arcsin(\sqrt{M+1} \cos \theta) - K] \quad (6.29)$$

³pour ce faire on utilise le résultat : $\int \frac{\sin \theta d\theta}{\sqrt{1-\alpha \cos^2 \theta}} = -\frac{1}{\sqrt{\alpha}} \arcsin(\sqrt{\alpha} \cos \theta)$.

où K est donné par la valeur initiale θ^0

$$K = \arcsin(\sqrt{M+1} \cos \theta^0). \quad (6.30)$$

Il ne reste plus qu'à inverser la fonction $t(\theta)$ (6.29) pour obtenir l'équation horaire de θ :

$$\theta(t) = \arccos \left(\frac{\sin (\mp \sqrt{2H(M+1)}t + K)}{\sqrt{M+1}} \right). \quad (6.31)$$

Pour obtenir l'expression de $\phi(t)$, on utilise une approche numérique plutôt que de tenter de résoudre analytiquement l'équation $\dot{\varphi} = J \cot^2 \theta$ qui est très difficile.

On remarque simplement que l'on peut exprimer la dérivée de la fonction $\theta(\varphi)$ caractérisant la dynamique du système :

$$\frac{d\theta}{d\varphi} = \pm \frac{\sqrt{2H - J^2 \cot^2 \theta}}{J \cot^2 \theta}. \quad (6.32)$$

Une représentation des solutions extrémales $\theta(\varphi)$ pour différentes conditions initiales est donnée sur la figure 6.2.

6.3 Mise en Oeuvre du Processus

Conformément aux résultats obtenus dans la section précédente (6.14), on passe en coordonnées sphériques pour décrire les états sur chacune des deux sphères S_i et S_f . On définit donc les angles (θ_i, φ_i) et (θ_f, φ_f) tels que :

$$\begin{cases} X_1 = \sin \theta_i \sin \varphi_i \\ X_3 = \cos \theta_i \\ X_5 = \sin \theta_i \cos \varphi_i \end{cases}, \quad (6.33)$$

et

$$\begin{cases} X_2 = \sin \theta_f \sin \varphi_f \\ X_4 = \cos \theta_f \\ X_6 = \sin \theta_f \cos \varphi_f \end{cases}. \quad (6.34)$$

On peut définir de nombreuses classes de problèmes selon les paramètres suivants : l'état initial (dont on sait seulement qu'il appartient à S_i), l'instant t_M où l'on effectue la mesure, l'observable que l'on mesure (donnée par ses états propres), et enfin la cible (appartenant nécessairement à S_f). On se propose d'étudier quatre cas différents qui mettent en avant le rôle décisif de

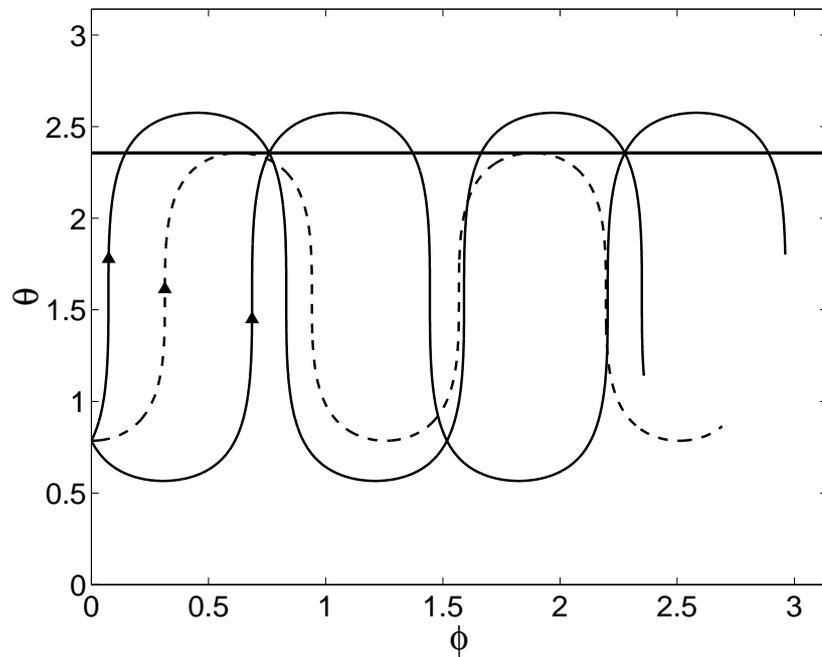


FIG. 6.2 – Représentation des trajectoires extrémales $\theta(\varphi)$ du modèle de Grushin sur la sphère pour $p_\varphi^0 = 2$, $\theta^0 = 4$ et différentes valeurs de p_θ^0 : 0 (en trait pointillé), ± 5 (en trait plein).

la mesure dans la stratégie de contrôle.

- Cas (a) : Cas où seules les conditions de bord sont fixées. On envisage le passage de $X_3 = 1$ à $X_4 = 1$, c'est-à-dire de l'état $|\Psi_0\rangle = |2\rangle$ à l'état $|\Psi_2\rangle = i|2\rangle$. Autrement dit on effectue une modification de phase sur l'état $|2\rangle$. La simplicité des trajectoires optimales pour ces conditions de bord permet la résolution complète du problème.

- Cas (b) : Passage de l'état $X_3 = 1$ à l'état $X_2 = 1$ où l'on suppose que l'observable \mathcal{Q} est de la forme

$$\mathcal{Q} = \frac{i}{\sqrt{3}}(\alpha|1\rangle\langle 1| + \beta|2\rangle\langle 2| + \gamma|3\rangle\langle 3|) \quad (6.35)$$

où α , β and γ sont des constantes réelles.

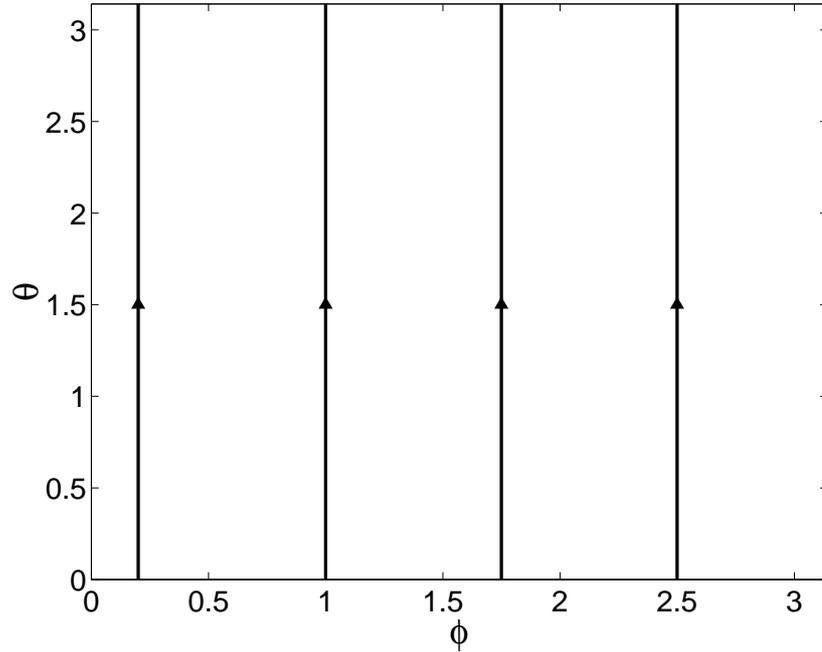
- Cas (c) : Cas où l'on symétrise la cible en fonction de la mesure. On passe d'un état quelconque de S_i à l'état $(\theta_f = \pi/2, \phi_f = \alpha)$ où $\alpha \in [0, 2\pi]$. Les états propres associés à la mesure sont respectivement donnés par $(\theta_f = \pi/4, \phi_f = 0)$, $(\theta_f = 3\pi/4, \phi_f = 0)$ et $(\theta_f = \pi/2, \phi_f = \pi/2)$. L'angle α est déterminé de sorte que le coût pour atteindre la cible depuis tous les états propres de \mathcal{Q} soit le même. Dans ce cas symétrique, on montre que la trajectoire optimale ne dépend pas de l'état initial.

- Cas (d) : Cas où l'on détermine le temps de mesure sur un problème fixé. On veut réaliser le passage de l'état $|\psi_i\rangle = |1\rangle$ à l'état $|\psi_f\rangle = e^{i\pi/4}/2|1\rangle + i\sqrt{2}|2\rangle + e^{-i\pi/4}/2|3\rangle$, c'est-à-dire $(\theta_f = \pi/4, \phi_f = \pi/4)$. Les trois états propres de la mesure sont $(\theta_f = 0, \phi_f = 0)$, $(\theta_f = \pi/2, \phi_f = 0)$ et $(\theta_f = \pi/2, \phi_f = \pi/2)$.

6.3.1 Cas (a)

D'abord, on résout le problème optimal sur S_i en partant de $X_3 = 1$. Ce point initial est caractérisé par $\theta_0 = 0$ (l'angle φ_0 étant quelconque). En utilisant les résultats de la section (6.2) précédente, on déduit que les trajectoires extrémales associées à la valeur de la constante du mouvement $p_\varphi = J = 0$. En effet, le cas $\theta_0 = 0$ correspond à un cas dégénéré qui n'est pas bien défini lorsque $j \neq 0$. A partir des équations (6.24), on peut directement voir que les trajectoires optimales sont les méridiens de la sphère d'équation $\phi_i = \text{cst}$. La synthèse optimale, c'est-à-dire l'ensemble de toutes les trajectoires optimales partant du point initial, est représentée sur la figure 6.3. En utilisant les expressions (6.22), on peut déterminer les champs de contrôle v_1 et v_2 correspondants qui sont donnés par :

$$\begin{cases} v_1 = 1 \\ v_2 = 0 \end{cases}, \quad (6.36)$$

FIG. 6.3 – Synthèse optimale pour l'état initial $\theta_i(0) = 0$.

pour le problème en temps minimum, et par :

$$\begin{cases} v_1 = \sqrt{2h_E} \\ v_2 = 0 \end{cases}, \quad (6.37)$$

où $h_E > 0$ pour le problème en énergie minimum. Soit (θ_i, ϕ_i) les coordonnées du point final sur S_i (celui que l'on va mesurer). Pour le problème en temps minimum, puisque $\dot{\theta} = 1$, on peut déduire que $C_{T,0} = \theta_i$. Pour le problème en énergie minimum, on a :

$$C_{E,0} = \int_0^T 2h_E dt = 2h_E T. \quad (6.38)$$

Et compte tenu de la relation $\theta_i = \sqrt{2h_E}T$, l'équation (6.38) donne $C_{E,0} = \theta_i^2/T$. Pour résumer, les calculs précédents donnent le coût pour atteindre un point de S_i en partant de $X_3 = 1$. La prochaine étape est d'effectuer la mesure sur le système. La mesure est associée à une observable \mathcal{Q} qui s'écrit :

$$\mathcal{Q} = \alpha|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + \beta|\phi_2\rangle\langle\phi_2| + \gamma|\phi_3\rangle\langle\phi_3|. \quad (6.39)$$

On suppose que les coordonnées des trois états propres $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$ et $|\phi_3\rangle$ se décomposent respectivement sur la sphère S_f par (θ_m, ϕ_m) , $(\theta_m + \pi/2, \phi_m)$

et $(\pi/2, \phi_m - \pi/2)$. Si on appelle C_i le coût pour atteindre $|\psi_f\rangle$ depuis l'état $|\phi_i\rangle$, alors après un calcul direct on aboutit à $C_1 = \theta_m$ (respectivement $C_1 = \theta_m^2/T$), $C_2 = \pi/2 + \theta_m$ (respectivement $C_2 = (\pi/2 + \theta_m)^2/T$) et $C_3 = \pi/2$ (respectivement $C_3 = \pi^2/4T$) pour le problème en temps minimum (respectivement pour le problème en énergie minimum). On peut ensuite déterminer l'expression des coûts totaux C_T and C_E à minimiser

$$C_T = \theta_i + a\theta_m + b\left(\frac{\pi}{2} + \theta_m\right) + c\frac{\pi}{2}, \quad (6.40)$$

et

$$C_E = \frac{1}{T}[\theta_i^2 + a\theta_m^2 + b\left(\frac{\pi}{2} + \theta_m\right)^2 + c\frac{\pi^2}{4}], \quad (6.41)$$

où a , b et c sont donnés par :

$$\begin{cases} a = [\sin \theta_i \sin \theta_m \sin(\phi_m - \phi_i) + \cos \theta_i \cos \theta_m]^2 \\ b = [\sin \theta_i \cos \theta_m \sin(\phi_m - \phi_i) - \cos \theta_i \sin \theta_m]^2 \\ c = \sin^2 \theta_i \cos^2(\phi_m - \phi_i) \end{cases} . \quad (6.42)$$

La dernière étape de la procédure d'optimisation est de minimiser C_T et C_E par rapport à (θ_i, ϕ_i) (c'est-à-dire par rapport au temps où l'on effectue la mesure) et à (θ_m, ϕ_m) (c'est-à-dire par rapport au choix de l'observable mesurée). Puisque $C_{T,E} \geq 0$, on voit que le choix optimal correspond à $\theta_i = \theta_m = 0$, ce qui conduit à $C_{T,E} = 0$. Pour déterminer une solution non triviale, on fixe l'observable \mathcal{Q} , c'est-à-dire les coordonnées θ_m et ϕ_m , et on cherche les valeurs de θ_i et ϕ_i qui minimisent le coût. La méthode étant équivalente en temps et en énergie minimum, on considère seulement le cas en temps minimum. On peut montrer que le minimum de C_T est atteint pour $\phi_m - \phi_i = \pi/2$ si $0 < \theta_m < \pi/2$ et pour $\phi_m - \phi_i = 3\pi/2$ si $\pi/2 < \theta_m < \pi$. En analysant les variations de C_T en fonction de θ_i , on déduit que la valeur optimale pour θ_i est 0 si $\theta_m \leq \arcsin(2/\pi)$ et $\theta_m \geq \pi - \arcsin(2/\pi)$. Dans les autres cas, le minimum est atteint pour

$$\theta_i = \theta_m - \frac{1}{2} \arcsin\left(\frac{2}{\pi}\right), \quad (6.43)$$

quand $\arcsin(2/\pi)/2 \leq \theta_m \leq \pi/2$ et pour

$$\theta_i = \pi - \theta_m - \frac{1}{2} \arcsin\left(\frac{2}{\pi}\right), \quad (6.44)$$

quand $\pi/2 \leq \theta_m \leq \pi - \arcsin(2/\pi)/2$. On note que la valeur maximum que θ_i peut atteindre est $\pi/2 - \arcsin(2/\pi)/2$.

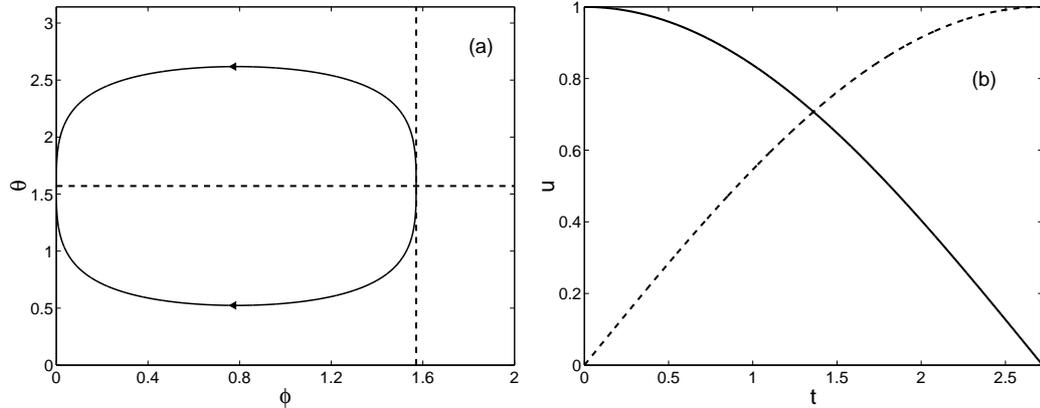


FIG. 6.4 – (a) Trajectoire optimale en temps minimum liant $X_2 = 1$ à $X_6 = 1$. Les extrémales supérieures et inférieures sont respectivement associées à $J = 1/\sqrt{3}$, $h_T = 1$ et $p_\theta = \pm\sqrt{h_T^2 - j^2}$. Les lignes pointillées horizontales et verticales sont d'équations respectives : $\theta = \pi/2$ et $\phi = \pi/2$. (b) Les champs optimaux $u_1(t)$ et $u_2(t)$ correspondants à ces trajectoires sont respectivement représentés en traits plein et pointillé.

6.3.2 Cas (b)

On résout séparément les problèmes de contrôle sur S_i et sur S_f . Puisque l'état initial est $X_3 = 1$, on déduit que $C_0^T = \theta_i$ et $C_0^E = \theta_i^2/T$ où θ_i est la coordonnée de l'état au moment où la mesure est effectuée. Sur S_f , on considère trois contrôles différents menant respectivement les états $X_2 = 1$, $X_4 = 1$ et $X_6 = 1$ à l'état $X_2 = 1$. Par construction, le premier coût C_1 est nul. En utilisant les résultats du cas (a), on obtient $C_2^T = \pi/2$ pour le problème en temps minimum, et $C_2^E = \pi^2/(4T)$ pour celui en énergie. L'expression du dernier contrôle C_3 est plus difficile à déterminer : on le cherche pour la trajectoire qui va de $(\theta = \pi/2, \phi = 0)$ à $(\theta = \pi/2, \phi = \pi/2)$. Pour le temps minimum, en utilisant l'équation (6.32), on voit que l'extrémale $\phi(\theta)$ dépend seulement, à un signe près, du ratio h_T/j . A partir des solutions analytiques des équations (6.32), on peut montrer que [124] les trajectoires optimales satisfont $h_T/j = \sqrt{3}$. Ce résultat est représenté sur la figure 6.4 avec les champs de contrôle optimaux u_1 et u_2 correspondant. En intégrant l'équation :

$$\dot{\theta} = \pm \frac{\sqrt{h_T^2 - j^2 \cot^2 \theta}}{h_T}, \quad (6.45)$$

on obtient que le temps de parcours de la trajectoire est $C_3^T = \pi\sqrt{3}/2$. Le

coût total est alors donné par

$$C_T = \theta_i + C_1^T \sin^2 \theta_i \sin^2 \phi_i + C_2^T \cos^2 \theta_i + C_3^T \sin^2 \theta_i \cos^2 \phi_i , \quad (6.46)$$

qui peut se simplifier en

$$C_T = \theta_i + C_2^T \cos^2 \theta_i + C_3^T \sin^2 \theta_i \cos^2 \phi_i . \quad (6.47)$$

C_T est minimum pour $\phi_i = \pi/2$. On a alors

$$C_T = \theta_i + C_2^T \cos^2 \theta_i , \quad (6.48)$$

qui est minimum pour

$$\theta_i = \frac{1}{2} \arcsin\left(\frac{2}{\pi}\right) . \quad (6.49)$$

Pour le problème en énergie, on a

$$C_E = \frac{\theta_i^2}{T} + C_2^E \cos^2 \theta_i + C_3^E \sin^2 \theta_i \cos^2 \phi_i , \quad (6.50)$$

dont le minimum peut être déterminé comme précédemment.

6.3.3 Cas (c)

Pour simplifier l'étude, on se limite ici seulement au problème en temps minimum. Comme il a été précédemment mentionné, on détermine l'état cible et l'angle α tels que les temps de parcours des trois trajectoires extrémales sur S_f soient identiques. Les trajectoires optimales et les champs de contrôle optimaux des extrémales partant de $(\theta = \pi/2, \phi = \pi/2)$ sont représentés sur la figure 6.5. Lorsqu'on change p_θ en $-p_\theta$ en gardant la même valeur de J , on obtient deux trajectoires partant respectivement de $(\theta = \pi/4, \phi = 0)$ et $(\theta = 3\pi/4, \phi = 0)$ qui sont symétriques par rapport à l'axe $\theta = \pi/2$. Ces deux extrémales se coupent sur cet axe au même instant. On détermine alors les paramètres des trajectoires partant de $(\theta = \pi/2, \phi = \pi/2)$ et $(\theta = \pi/4, \phi = 0)$ avec la condition d'intersection au même instant sur l'axe $\theta = \pi/2$. Ce problème est résolu numériquement. On obtient $p_\theta(0) \simeq 0.6272$ et $J = -1$ pour la première extrémale, et $p_\theta(0) \simeq -0.9245$ et $J = 1$ pour la seconde. Ces deux extrémales se coupent en $\phi \simeq 1.091$ à l'instant $t \simeq 1.668$. Soit T_0 le coût correspondant aux trois trajectoires Le coût total C_T est donné par

$$C_T = C_0 + T_0 . \quad (6.51)$$

Puisque par définition $C_0 \geq 0$, la solution optimale est $C_0 = 0$, c'est-à-dire que la mesure doit nécessairement être effectuée à l'instant $t = 0$. Ainsi, le résultat est indépendant de l'état initial sur S_i choisi.

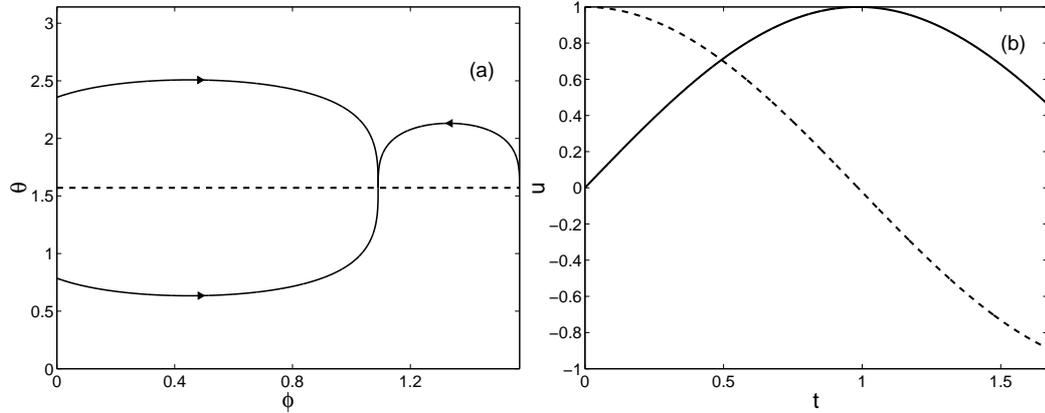


FIG. 6.5 – (a) Trajectoires optimales pour le problème en temps minimum des différents états de la mesure jusqu'à la cible. (b) Les champs optimaux $u_1(t)$ et $u_2(t)$ correspondant à la trajectoire partant de $(\theta = \pi/2, \phi = \pi/2)$ sont respectivement représentés en trait solide et en pointillés.

6.3.4 Cas (d)

Ici, de nouveau, on se concentre uniquement sur le problème en temps minimum. En utilisant l'équation (6.28) de la section précédente, le temps où la mesure doit être effectuée pour aller de l'état $(\pi/2, 0)$ à l'état (θ_i, ϕ_i) est

$$C_0 = \frac{-1}{\sqrt{1+m_i^2}} \arcsin(\sqrt{1+m_i^2} \cos \theta_i), \quad (6.52)$$

avec $m_i = j/h_T$. Pour établir l'équation (6.52), on doit supposer que la fonction $\theta(t)$ croît avec le temps. De plus, on note que la valeur ϕ_i dépend de la constante m_i choisie. En d'autres termes, minimiser le coût par rapport à (θ_i, ϕ_i) est équivalent à minimiser le coût par rapport à θ_i et m_i . On détermine ensuite le coût pour atteindre l'état cible depuis chaque état propre de l'opérateur. A partir de $(\theta_f = 0, \phi_f = 0)$, les résultats du cas (a) donnent $C_1 = \pi/4$. Par symétrie, il est évident que les coûts des trajectoires partant de $(\theta_f = \pi/2, \phi_f = 0)$ et $(\theta_f = \pi/2, \phi_f = \pi/2)$ sont les mêmes, c'est-à-dire : $C_2 = C_3 = C$. On détermine numériquement ces coûts et on obtient $m_f \simeq 1/1.126$ correspondant à $C = 1.422$. En utilisant l'équation (6.28), on peut montrer que

$$C = \frac{2\pi}{2\sqrt{1+m_f^2}} - \frac{1}{\sqrt{1+m_f^2}} \arcsin\left(\frac{\sqrt{1+m_f^2}}{\sqrt{2}}\right). \quad (6.53)$$

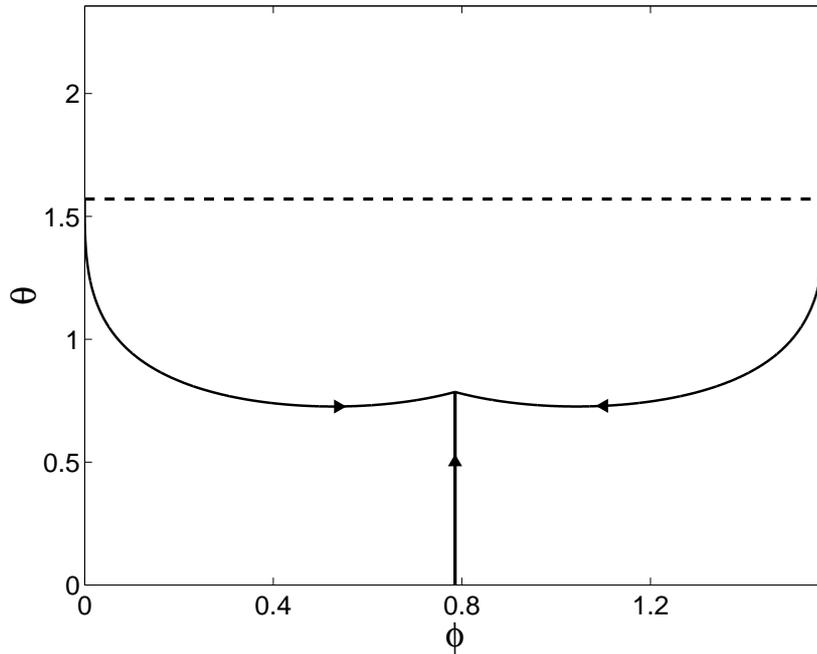


FIG. 6.6 – Trajectoire optimale pour le problème en temps minimum partant des différents état de la mesure jusqu'à l'état cible.

Pour calculer C , on doit utiliser le fait que la trajectoire extrémale θ n'est pas une fonction monotone du temps et que son minimum est $\arccos(1/\sqrt{1+m_f^2})$. La figure 6.6 représente les trois trajectoires optimales atteignant l'état cible. Un calcul direct du coût total C_T montre que

$$C_T = C_0 + \frac{\pi}{4} \cos^2 \theta_i + C(\sin^2 \theta_i \cos^2 \phi_i + \sin^2 \theta_i \sin^2 \phi_i) \quad (6.54)$$

$$= C_0 + \frac{\pi}{4} \cos^2 \theta_i + C \sin^2 \theta_i . \quad (6.55)$$

C_T est alors minimisé par rapport à θ_i et à ϕ_i . On observe bien numériquement que les solutions correspondent à $C_0 = 0$. Le coût total est donné par $C_T = C$. On peut obtenir des résultats semblables pour des valeurs d'angles initiales différentes de $\pi/2$.

Conclusion et Perspectives

L'objet principal de ce travail de thèse était d'appliquer la théorie mathématique du contrôle optimal à des systèmes modèles de mécanique quantique suffisamment simples pour en comprendre et extraire les principaux mécanismes.

Afin d'introduire le thème du contrôle quantique, on a d'abord travaillé sur un problème type : l'alignement moléculaire. On a effectué cette étude en milieu dissipatif par deux méthodes numériques différentes donnant des résultats assez proches. Il a été mis en avant que le caractère dissipatif de la dynamique nuisait grandement à l'efficacité du processus. Des études expérimentales sur ce type de système ont récemment été effectuées [133].

On a ensuite introduit une nouvelle approche jusqu'ici peu employée dans le domaine de la physique quantique : le contrôle optimal géométrique, où l'objectif est d'atteindre une cible en minimisant une certaine fonctionnelle de coût. De tels problèmes, dont la résolution passe essentiellement par un point de vue géométrique, sont typiquement scindés en deux parties distinctes : déterminer l'ensemble des états accessibles (contrôlabilité) puis trouver les trajectoires minimisant le coût (optimalité).

Comme première illustration de cette théorie, on a fait le choix d'un système à deux niveaux en milieu dissipatif contrôlé par une impulsion laser polarisée linéairement. Un tel système, bien qu'élémentaire, possède déjà beaucoup de richesse et plusieurs cas doivent être envisagés selon la nature de la dissipation. Dans certains cas particuliers, on a montré que la dissipation pouvait jouer un rôle bénéfique en favorisant le processus attendu et en accélérant le contrôle.

Certains systèmes, dont les systèmes dissipatifs, ne sont pas complètement contrôlables. En seconde application de la théorie du contrôle optimal, on a fait une étude d'un système à 3 niveaux non complètement contrôlable,

et montré comment une mesure de type von Neumann pouvait assister le contrôle en permettant d'atteindre des états a priori non unitairement accessibles.

Ces exemples illustrent le fait que l'étude d'un problème de contrôle optimal de système quantique dissipatif de dimension finie peut se ramener à un problème de structure Hamiltonienne (bien que l'Hamiltonien de Pontryagin dont il est question n'a pas d'interprétation physique propre).

Suite aux travaux effectués dans cette thèse, un nombre important de perspectives peut être envisagé :

- Nous pensons travailler avec des modèles plus réalistes, prenant par exemple en compte des paramètres expérimentaux, comme dans l'étude effectuée sur l'alignement moléculaire. De tels systèmes, a priori de dimensions assez importantes par rapport aux modèles traités dans ce rapport, seraient alors nécessairement traités numériquement par des algorithmes de tir ;

- Nous envisagerons une étude théorique de systèmes possédant des dynamiques plus complexes et donc susceptibles d'exhiber une plus grande richesse de phénomènes, tels que les systèmes non-Markoviens dont la dynamique est décrite par une équation intégro-différentielle. Le problème des systèmes de dimension infinie peut aussi être soulevé. Les outils mathématiques dans ces deux cas seront adaptés au cas de la dimension infinie.

- Nous voudrions également prendre en compte la robustesse. Un processus de contrôle est dit *robuste* lorsque de faibles variations par rapport aux paramètres idéaux de contrôle n'entraînent pas un changement drastique de comportement du système. C'est une propriété naturellement requise en vue d'une faisabilité expérimentale. Contrairement aux processus adiabatiques, qui possèdent cette propriété importante par construction, la robustesse des processus issus de la théorie du contrôle optimal reste à tester une fois les solutions obtenues. Dans le cadre de la théorie du contrôle optimal, il existe donc un problème mathématique complexe et encore ouvert : trouver une fonctionnelle de coût qui, une fois minimisée, assurerait la robustesse du champ de contrôle obtenu.

- Finalement, nous envisageons de modéliser un processus de mesure plus réaliste que celui proposé dans cette thèse pour s'affranchir de la non-contrôlabilité.

Bibliographie

- [1] D. Sugny, C. Kontz, M. Ndong, Y. Justum, G. Dive, et M. Desouter-Lecomte, *Laser control in a bifurcating region*, Phys. Rev. A **74**, 043419 (2006).
- [2] D. Sugny, C. Kontz et H. R. Jauslin, *Target states and control of molecular alignment in a dissipative medium*, Phys. Rev. A **74**, 053411 (2006).
- [3] D. Sugny, C. Kontz et H. R. Jauslin, *Time-optimal control of a two-level dissipative quantum system*, Phys. Rev. A **76**, 023419 (2007).
- [4] D. Sugny et C. Kontz, *Optimal control of a three-level quantum system by laser fields plus von Neumann measurements*, Phys. Rev. A **77**, 063420 (2008).
- [5] L. P. Yatsenko, S. Guérin, et H. R. Jauslin, *Topology of adiabatic passage*, Phys. Rev. A **65**, 043407 (2002).
- [6] D. Viennot, G. Jolicard et J. P. Killingbeck, *The topology of the adiabatic passage process for molecular photodissociative dynamics*, J. Phys. A : Math. Theor. **41**, 145303 (2008).
- [7] J. C. Maxwell, *On Governors*, Proceedings of the Royal Society no. **100** (1868).
- [8] B. Friedland, *Control system design : an introduction to state-space methods*, McGraw-Hill (1986).
- [9] N. S. Nise, *Control Systems Engineering - Fourth Edition*, John Wiley & Sons (2003).
- [10] H. P. Geering, *Optimal Control With Engineering Applications*, Springer (2007).
- [11] D. Leonard et N. V. Long, *Optimal Control Theory and Static Optimization in Economics*, Cambridge University Press (1992).
- [12] S. P. Sethi et G. L. Thompson, *Optimal Control Theory : Applications to Management Science And Economics - Second Edition*, Springer (2005).

- [13] B. Bonnard, J.-B. Caillau et E. Trélat, *Geometric optimal control of elliptic Keplerian orbits*, Discrete Cont. Dyn. Syst. Series B **5**, 4 (2005).
- [14] B. Bonnard, L. Faubourg et E. Trélat, *Mécanique céleste et contrôle des véhicules spatiaux*, Springer (2006).
- [15] B. Bonnard et J.-B. Caillau, *Optimality results in orbit transfer*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, Académie des Sciences **345** (2007).
- [16] E. Trélat, *Contrôle optimal : Théorie et applications*, Vuibert (2005).
- [17] Y. Yamamoto et A. Imamoglu, *Mesoscopic Quantum Optics*, Wiley-Interscience (1999).
- [18] J. Perina, Z. Hradil et B. Jurco, *Quantum Optics and Fundamentals of Physics*, Kluwer Academic Publishers (1994).
- [19] U. Gaubatz, P. Rudecki, S. Schiemann et K. Bergmann *Population Transfer Between Molecular Vibrational Levels by Stimulated Raman Scattering with Partially Overlapping Laser : A New Concept and Experimental Results*, J. Chem. Phys. **92**, 5363 (1990).
- [20] K. Bergmann, H. Theuer et B. W. Shore, *Coherent Population Transfer Among Quantum States of Atoms and Molecules*, Rev. Mod. Phys. **70**, 1003 (1998).
- [21] N. V. Vitanov, T. Halfmann, B. W. Shore et K. Bergmann, *Laser-induced population transfert by adiabatic passage techniques*, Ann. Rev. Phys. Chem. **52**, 763 (2001).
- [22] A. G. Butkovskiy et Y. I. Samoilenko, *Control of Quantum Mechanical Processes and Systems*, Springer (1990).
- [23] D. d'Alessandro, *Introduction to Quantum Control and Dynamics*, Chapman & Hall/CRC (2007).
- [24] W. Warren, H. Rabitz et M. Dahleh, Sciences **259**, 1581 (1993).
- [25] H. Rabitz, R. de Vivie-Riedle, M. Motzkus et K. Kompa, Sciences **288**, 824 (2000).
- [26] L. D. Davis, *Handbook of Genetic Algorithms*, Van Nostrand Reinhold, (1991).
- [27] L. D. Davis, K. de Jong, M. D. Vose, et L. D. Whitley, *Evolutionary Algorithms*, Springer (1999).
- [28] X. Chu et S.-I. Chu, *Optimization of high-order harmonic generation by genetic algorithm and wavelet time-frequency analysis of quantum dipole emission*, Phys. Rev. A **64**, 021403 (2001).
- [29] K. H. Kramer et R. B. Bernstein, *Sudden Approximation Applied to Rotational Excitation of Molecules by Atoms I : Low-Angle Scattering*, J. Chem. Phys. **40**, 200 (1964).

-
- [30] C. M. Dion, A. Keller et O. Atabek, *Orienting molecules using half-cycle pulses* Eur. Phys. J. D. **14**, 249 (2001).
- [31] A. M. Lyapunov *General Problem of the Stability Of Motion*, Taylor & Francis (1992).
- [32] E. Sontag, *Mathematical Control Theory : Deterministic Finite Dimensional Systems - Second Edition*, Springer (1998).
- [33] R. C. Dorf et R. H. Bishop, *Modern Control Systems - 11th Edition*, Prentice Hall (2007).
- [34] A. Aspect, C. Fabre, and G. Grynberg. *Optique quantique 1 : Lasers*. Ecole Polytechnique, 2002. cours de la Majeure de Physique.
- [35] J. Werschnik et E. K. U. Gross, *Quantum Optimal Control Theory*, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **40**, R175 (2007).
- [36] R. S. Judson et H. Rabitz, Phys. Rev. Lett. **68**, 1500 (1992).
- [37] W. Zhu, J. Botina et H. Rabitz, J. Chem. Phys. **108**, 1953 (1998).
- [38] W. Zhu et H. Rabitz, J. Chem. Phys. **109**, 385 (1998).
- [39] Y. Ohtsuki, G. Turinici et H. Rabitz, J. Chem. Phys. **120**, 5509 (2004).
- [40] B. d'Espagnat, *Conceptual Foundations Of Quantum Mechanics - Second Edition*, Westview Press (1999).
- [41] W. Pauli, Festschrift zum **60**. Geburtstag A. Sommerfelds (Hirzel, Leipzig, 1928).
- [42] A. G. Redfield, *On the theory of relaxation processes*, IBM J. Res. Dev. **1**, 19 (1957).
- [43] E. B. Davies, *Quantum Theory of Open Systems*, Academic Press, (1976).
- [44] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems - Second Edition*, World Scientific, (1999).
- [45] S. Attal, A. Joye et C.-A. Pillet, *Quantum Open Systems. Vol I : The Hamiltonian approach*, Springer Verlag, Lecture Notes in Mathematics, 1880 (2006).
- [46] S. Attal, A. Joye et C.-A. Pillet, *Quantum Open Systems. Vol II : The Markovian approach*, Springer Verlag, Lecture Notes in Mathematics, 1881 (2006).
- [47] H. Carmichael, *An open systems approach to quantum optics*, Springer, (1993).
- [48] H.P. Breuer et F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press, (2002).

- [49] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Dover Publications (1999).
- [50] K. Kraus, *States, Effects, and Operations : Fundamental Notions of Quantum Theory*, Springer-Verlag (1983).
- [51] G. Lindblad, *On the generators of quantum dynamical semigroups*, Commun. Math. Phys. **48** 119 (1976).
- [52] V. Gorini, A. Kossakowski et E. C. G. Sudarshan, *Completely positive semigroups of N-level systems*, J. Math. Phys. **17** 821 (1976).
- [53] J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press (1955).
- [54] I. R. Senitzky, *Dissipation in Quantum Mechanics. The Harmonic Oscillator*, Phys. Rev. **119**, 670 (1960).
- [55] I. R. Senitzky, *Dissipation in Quantum Mechanics. The Harmonic Oscillator II*, Phys. Rev. **124**, 642 (1961).
- [56] B. Fain, *Irreversibilities in Quantum Mechanics*, Kluwer Academic Publishers (2000).
- [57] C. W. Gardiner, P. Zoller, *Quantum Noise - Third Edition*, Springer (2004).
- [58] R. Alicki et M. Fannes, *Quantum Dynamical Systems*, Oxford University Press (2001).
- [59] R. Alicki et K. Lendi, *Quantum Dynamical Semigroups and Applications*, Springer (1987).
- [60] H. Spohn, *Kinetic equations from Hamiltonian dynamics : Markovian limits*, Rev. Mod. Phys. **52**, 569 (1980).
- [61] K. Kraus, *General State Changes in Quantum Theory*, Ann. Phys. **64**, 311 (1971).
- [62] M. D. Choi, Can. J. Math. **24**, 520 (1972).
- [63] L. Hughston, R. Jozsa, et W. Wootters, *A Complete Classification of Quantum Ensembles Having a Given Density Matrix*, Phys. Lett. A **183**, 14 (1993).
- [64] M. A. Nielsen et I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (2000).
- [65] J. Preskill, *Quantum Information and Computation*, Lecture notes for Physics 229 (1998).
- [66] N. Gisin , Helv. Phys. Acta **62**, 363 (1989).
- [67] F. Benatti, R. Floreanini et R. Romano, *Complete positivity and dissipative factorized dynamics*, J. Phys. A : Math. Gen. **35** L551 (2002).

- [68] F. Haake, *Statistical treatment of open systems by generalized master equations*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. **66** (1973).
- [69] F. Bloch, Phys. Rev. **70**, 460 (1946).
- [70] E. Charron, A. Giusti-Suzor et F. H. Mies, Phys. Rev. A **49**, R641 (1994).
- [71] M. G. Tenner, E. W. Kuipers, A. W. Kleyn et S. Stolte, J. Chem. Phys. **94**, 5197 (1991).
- [72] R. A. Bartels, T. C. Weinacht, N. Wagner, M. Baertschy, C. H. Greene, M. M. Murnane et H. C. Kapteyn, Phys. Rev. Lett. **88**, 013903 (2002).
- [73] Z.-C. Yan et T. Seideman, J. Chem. Phys. **111**, 4113 (1999).
- [74] R. J. Gordon, L. C. Zhu, W. A. Schroeder et T. Seideman, J. Appl. Phys. **94**, 669 (2003).
- [75] J. Itatani, J. Levesque, D. Zeidler, H. Niikura, H. Pepin, J. C. Kieffer, P. B. Corkum et D. M. Villeneuve, Nature **432**, 867 (2004).
- [76] K. F. Lee, D. M. Villeneuve, P. B. Corkum et E. A. Shapiro, Phys. Rev. Lett. **93**, 233601 (2004).
- [77] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics - 3rd edition*, John Wiley & Sons Inc (1999).
- [78] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics - 3rd Edition*, Benjamin Cumming (1999).
- [79] W. Appel, *Mathématiques pour la Physique et les Physiciens! - 2ème Edition*, H&K (2002).
- [80] H. Stapelfeldt et T. Seideman, Rev. Mod. Phys. **75**, 543 (2003).
- [81] T. Seideman et E. Hamilton, Adv. At., Mol., Opt. Phys. **52**, 289 (2006).
- [82] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique Quantique - Tome 1*, Hermann (1997).
- [83] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique Quantique - Tome 2*, Hermann (1997).
- [84] S. Ramakrishna et T. Seideman, Phys. Rev. Lett. **95**, 113001 (2005).
- [85] S. Ramakrishna et T. Seideman, J. Chem. Phys. **112**, 084502 (2005).
- [86] D. Sugny, A. Keller, O. Atabek, D. Daems, S. Guérin et H. R. Jauslin, Phys. Rev. A **69**, 043407 (2004).
- [87] O. Atabek et C. M. Dion, *Molecular Alignment and Orientation : From Laser-Induced Mechanisms to Optimal Control*, CRM Proc. Lecture Notes **33**, 1 (2003).
- [88] A. Belikov et M. Smith, J. Chem. Phys. **110**, 8513 (1999).

- [89] S. Ramakrishna et T. Seideman, *J. Chem. Phys.* **124**, 034101 (2006).
- [90] M. D. Girardeau, M. Ina, S. G. Schirmer et T. Gulsrud, *Phys. Rev. A* **55**, R1565 (1997).
- [91] M. D. Girardeau, S. G. Schirmer, J. V. Leahy et R. M. Koch, *Phys. Rev. A* **58**, 2684 (1998).
- [92] D. Sugny, A. Keller, O. Atabek, D. Daems, C. M. Dion, S. Guérin et H. R. Jauslin, *Phys. Rev. A* **71**, 063402 (2005).
- [93] D. Sugny, A. Keller, O. Atabek, D. Daems, C. M. Dion, S. Guérin et H. R. Jauslin, *Phys. Rev. A* **72**, 032704 (2005).
- [94] C. M. Dion, A. Keller et O. Atabek, *Phys. Rev. A* **72**, 023402 (2005).
- [95] E. B. Lee et L. Markus, *Foundations of Optimal Control Theory*, John Wiley and Sons, (1967).
- [96] V. I. Arnold, *Ordinary Differential Equations*, MIT Press, (1978).
- [97] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics - Second Edition*, Springer-Verlag, (1989).
- [98] C. J. Isham, *Modern Differential Geometry for Physicists - Second Edition*, World Scientific Publishing, (2001).
- [99] A. A. Agrachev et Y. L. Sachkov, *Control Theory from the Geometrical Viewpoint*, Springer-Verlag, (2004).
- [100] L. S. Pontryagin, V. G. Boltyanskh, R. V. Gamkrelidze et E. F. Mishcheknko, *The Mathematical Theory of the Optimal Process*, Wiley-Interscience, (1962).
- [101] V. Jurdjevic, *Geometric Control Theory*, Cambridge University Press, (1996).
- [102] H. Goldstein, J. L. Safko et C. P. Poole, *Classical Mechanics - 3rd Edition*, Addison Wesley (2001).
- [103] G. S. Agarwal, *Rotating-Wave Approximation and Spontaneous Emission*, *Phys. Rev. A* **4**, 1778 (1971).
- [104] P. L. Knight et L. Allen, *Rotating-Wave Approximation in Coherent Interactions*, *Phys. Rev. A* **7**, 368 (1973).
- [105] B. W. Shore, *Two-level behavior of coherent excitation of multilevel systems*, *Phys. Rev. A* **24**, 1413 (1981).
- [106] J. M. Ball, J. E. Marsden et M. Slemrod, *Controllability for distributed bilinear systems*, *J. Control and Optimization* **20**, 575 (1982).
- [107] G. M. Huang, T. J. Tarn et J. W. Clark, *On the controllability of quantum mechanical systems*, *J. Math. Phys.* **24**, 2608 (1983).

- [108] V. Ramakrishna, M. Salapaka, M. Dahleh, H. Rabitz et A. Peirce, *Controllability of molecular systems*, Phys. Rev. A **51**, 960 (1995).
- [109] H. Fu, S. G. Schirmer et A. I. Solomon, *Complete controllability of finite-level quantum systems*, J. Phys. A **34**, 1679 (2001).
- [110] S. G. Schirmer, H. Fu et A. I. Solomon, *Complete controllability of quantum systems* Phys. Rev. A **63**, 063410 (2001).
- [111] C. Altafini, *Controllability properties for finite dimensional quantum markovian master equations*, J. Math. Phys. **44**, 2357 (2003).
- [112] C. Altafini, Phys. Rev. A **70**, 062321 (2004).
- [113] N. Jacobson, *Lie Algebras*, Dover Publications (1962).
- [114] R. Hermann, *Lie groups for physicists*, W. A. Benjamin (1966).
- [115] R. Gilmore, *Lie groups, Lie algebras, and some of their applications*, Wiley (1974).
- [116] J. F. Cornwell, *Group theory in physics : an introduction*, Academic Press (1997).
- [117] W. Magnus. *On the exponential solution of differential equations for a linear operator*, Comm. Pure and Appl. Math. **VII**, 649 (1954).
- [118] S. G. Schirmer, A. I. Solomon et J. V. Leahy, *Criteria for reachability of quantum states*, J. Phys. A **35**, 8551 (2002).
- [119] F. T. Hioe and J. H. Eberly, Phys. Rev. Lett. **47**, 838 (1981).
- [120] G. Kimura, *The Bloch Vector for N-level Systems*, Phys. Lett. A **314**, 339 (2003).
- [121] S. G. Schirmer, T. Zhang et J. V. Leahy *Orbits of quantum states and geometry of Bloch vectors for N-level systems*, J. Phys. A **37**, 1389 (2004).
- [122] U. Boscain et B. Piccoli, *Optimal Syntheses for Control Systems on 2-D Manifolds*, Springer SMAI, (2005).
- [123] A. I. Solomon et S. G. Schirmer, *Limitation on quantum control*, Intl. J. Mod. Phys. B **16**, 2107 (2002).
- [124] U. Boscain, G. Charlot, J.-P. Gauthier, S. Guérin et H. R. Jauslin, J. Math. Phys. **43**, 2107 (2002).
- [125] A. Pechen, N. Il'in, F. Shuang et H. Rabitz, Phys. Rev. A **74**, 052102 (2006).
- [126] J. Gong et S. A. Rice, J. Chem. Phys. **120** 9984 (2004).
- [127] L. Roa et G. A. Olivares-Rentería, Phys. Rev. A **73**, 062327 (2006).

-
- [128] L. Roa, A. Delgado, M. L. Ladron de Guevara et A. B. Klimov, Phys. Rev. A **73**, 012322 (2006).
- [129] M. Sugawara, J. Chem. Phys. **123**, 204115 (2005).
- [130] F. Shuang, A. Pechen, T.-S. Ho et H. Rabitz, J. Chem. Phys. **126**, 134303 (2007).
- [131] R. Vilela Mendes et V. I. Man'ko, Phys. Rev A **67**, 053404 (2003).
- [132] A. Agrachev, U. Boscain et M. Sigalotti, Discrete Contin. Dyn. Syst. **20**, 801 (2008).
- [133] T. Vieillard, F. Chaussard, D. Sugny, B. Lavorel et O. Faucher, *Field-free molecular alignment of CO₂ mixtures in presence of collisional relaxation*, J. Raman Spectrosc **39**, 694 (2008).

Contrôle Optimal de la Dynamique Dissipative de Systèmes Quantiques

Résumé : On étudie le contrôle de systèmes quantiques en dimension finie soumis à des champs laser externes. Après avoir examiné l'exemple concret de l'alignement d'une molécule diatomique en milieu dissipatif, on s'intéresse au problème spécifique du *contrôle optimal*, où l'objectif est d'amener le système d'un état initial à un certain état final tout en minimisant une fonctionnelle de coût. Le principe du maximum de Pontryagin (PMP) fournit les conditions nécessaires d'optimalité, en établissant que toute trajectoire optimale est la solution extrémale d'un problème étendu de structure Hamiltonienne. Dans ce contexte, on procède à l'analyse de deux systèmes particuliers. Le premier est un système dissipatif à 2 niveaux, dont on souhaite déterminer l'ensemble des trajectoires en temps minimum ; le second est un système conservatif à 3 niveaux non complètement contrôlable, où une mesure projective permet d'assister le processus de contrôle.

Mots clefs : équation pilote de Lindblad, contrôle quantique, ensemble accessible, principe du maximum de Pontryagin, alignement moléculaire.

Optimal Control of Dissipative Quantum Systems

Abstract : We study the control of finite dimensional quantum systems by external laser fields. After examining the concrete example of the diatomic molecular alignment in dissipative media, we are interested in the problem of *optimal control*, where the objective is to bring the system from an initial state into a given final state while minimizing a cost functional. The Pontryagin maximum principle (PMP) provides necessary conditions for optimality, by establishing that any optimal trajectory is the extremal solution of an extended problem of Hamiltonian structure. In this context, we perform the analysis of two particular systems. The first one is a dissipative 2-level system, for which we determine the set of time optimal trajectories ; the second one is a not completely controllable conservative 3-level system, where a projective measure allows one to assist the control process.

Key words : Lindblad master equation, quantum control, attainable set, Pontryagin maximum principle, molecular alignment.