



HAL
open science

Dynamique et contrôle des systèmes quantiques

Mazyar Mirrahimi

► **To cite this version:**

Mazyar Mirrahimi. Dynamique et contrôle des systèmes quantiques. Mathematics [math]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2005. English. NNT : . pastel-00001610

HAL Id: pastel-00001610

<https://pastel.hal.science/pastel-00001610>

Submitted on 19 Jun 2006

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.

DYNAMIQUE ET CONTRÔLE DES SYSTÈMES QUANTIQUES

Thèse présentée à

L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DES MINES DE PARIS

par

MAZYAR MIRRAHIMI

en vue de l'obtention du titre de

Docteur en Mathématiques et Automatique,

Soutenue publiquement le 23 Novembre 2005, devant le jury composé de :

Rapporteurs : Rodolphe Sepulchre
Michel Sorine

Examineurs : Jean Michel Coron
Otared Kavian
Pierre Rouchon
Gabriel Turinici

Remerciements

Cette thèse a été avant tout pour moi une ouverture vers un autre monde scientifique. Le monde où l'interprétation physique d'un problème mathématique est aussi importante que le problème-même. Je dois mon entrée dans ce monde à Pierre Rouchon. Ce point de vue m'a toujours aidé au cours de la thèse et m'a permis de collaborer avec des physiciens. Je tiens surtout à le remercier pour m'avoir proposé ce sujet de contrôle quantique, sujet qui m'a passionné de plus en plus au cours de la thèse. Finalement je voudrais remercier Pierre pour sa disponibilité remarquable en tant que directeur de thèse. Il a été un directeur de thèse exceptionnel.

Je tiens aussi à remercier Gabriel Turinici mon co-directeur de thèse pour son soutien et les discussions très profitables. Il a surtout été très ouvert envers les problèmes que j'ai regardés, ce qui m'a permis d'étudier les différents aspects du sujet. Il m'a aussi offert un contact très efficace avec des chimistes de premier plan. J'ai ainsi pu présenter mes résultats théoriques aux chimistes.

Je remercie particulièrement Rodolphe Sepulchre et Michel Sorine d'avoir accepté d'être rapporteurs pour ma thèse et d'y avoir consacré une telle énergie. Je remercie également Jean-Michel Coron et Otared Kavarian d'avoir accepté de participer à mon jury de thèse.

Je remercie le Centre Automatique et Systèmes de l'École des Mines de Paris, qui m'a accueilli pour mes activités de recherche durant la thèse. Je remercie en particulier, Philippe Martin, le directeur du centre, pour son soutien et Madame Annick Le Gallic pour toutes les démarches administratives. Je pense aussi à Laurent Praly pour ses remarques qui m'ont été très utiles. Un merci particulier à Laure Sinègre, Silvère Bonnabel et Erwan Salaün pour m'avoir aidé dans la rédaction de la thèse et je m'excuse pour l'abus de leurs temps.

Je remercie également le CERMICS à l'École Nationale des Ponts et Chaussées, qui m'a accueilli en partie durant ces deux années de thèse. Je remercie particulièrement Claude Le Bris pour son soutien et les discussions très intéressantes. Je tiens aussi à remercier Sylvie Berte pour m'avoir aidé dans les démarches administratives.

Dans le cadre de cette thèse, j'ai pu profiter d'un certain nombre de collaborations. Je tire parti de cette occasion pour remercier les gens qui m'ont aidé dans ce travail.

Je remercie tout d'abord Karine Beauchard qui a été une partenaire de qualité lors de nombreuses discussions ou actions communes. Je tiens aussi à remercier Jean-Michel Coron

pour avoir été un interlocuteur formidable. Ses conseils et remarques m'ont beaucoup servi dans ce travail de recherche.

Le séjour de deux mois à Caltech que j'ai effectué aux mois de mai et juin 2005 m'a beaucoup aidé pour la suite de mes recherches et pour me lancer sur la nouvelle piste du feedback quantique. Je remercie particulièrement Hideo Mabuchi pour son accueil et pour les sujets de recherches très passionnants qu'il m'a proposés. Je remercie également Ramon Van Handel qui a été un collaborateur fantastique. Grâce à lui j'ai pu me familiariser avec les filtres quantiques, ce qui m'a servi de base pour avancer sur le sujet de feedback quantique. Je tiens aussi à remercier Houman Owhadi, JM Geremia et John K. Stockton pour les discussions très intéressantes. Je remercie également Richard Murray qui a rendu cette visite possible.

Je remercie les membres de l'Action Concertée Incitative "Simulation Moléculaire" Yvon Maday, Eric Cancès, Julien Salomon,

Je remercie Herschel Rabitz pour les discussions et les conseils très profitables.

Enfin, mes remerciements s'adressent à Dena et à mes parents qui ont su m'aider là où eux seulement pouvaient le faire.

Résumé

Mots clefs : Contrôle non-linéaire, Systèmes quantiques, Équation de Schrödinger, Équation de Lindblad, Filtres quantiques, Contrôlabilité, Techniques de Lyapounov, Identification, Méthodes numériques, Contrôle stochastique, Feedback quantique.

Dans cette thèse, nous étudions trois classes de modèles utilisés dans la littérature pour représenter les systèmes quantiques :

- L'équation de Schrödinger où le contrôle agit sur le système de façon bilinéaire ;
- L'équation de Lindblad ;
- Les filtres quantiques (modèles stochastiques).

Les contributions de la thèse concernant l'équation de Schrödinger se répartissent en trois parties.

Dans le premier chapitre, nous étudions la contrôlabilité d'un tel système. Le cas de dimension finie étant déjà bien exploré, nous traitons l'exemple d'un oscillateur harmonique quantique comme un cas typique des problèmes de dimension infinie. Parmi les résultats obtenus nous retrouvons transposée dans les termes de la théorie du contrôle, l'assertion bien connue des physiciens : "les sources classiques de contrôle ne peuvent générer que de la lumière classique".

La question de la génération des trajectoires est abordée dans le Chapitre 2. Le contrôle en boucle ouverte du système est alors traité à l'aide des méthodes de stabilisation de Lyapounov. Ces méthodes de contrôle par feedback sont utilisées en simulation et le contrôle retrouvé est ensuite inséré en boucle ouverte dans le système physique. La convergence est étudiée dans différentes configurations et des exemples numériques tirés de la chimie quantique sont testés.

Enfin dans le chapitre 3, nous étudions le problème inverse d'identification de l'Hamiltonien. Malgré le grand intérêt pratique que présente ce problème, peu de contributions ont été apportées jusqu'à maintenant. Nous étudions d'abord le problème mathématique d'identifiabilité. Une première réponse positive à cette question est apportée. Ensuite nous considérons le problème d'identification. À l'aide de méthodes numériques d'optimisation, nous proposons une première approche qui permet de résoudre ce problème inverse.

Au sujet de l'équation de Lindblad, la contribution de cette thèse se résume à la

réduction du modèle lorsque certaines hypothèses sur les durées de vie atomiques sont vérifiées. Cette étude peut être considérée comme une première étape vers le contrôle en boucle fermée d'un ensemble statistique de systèmes quantiques.

Finalement dans le chapitre 5, nous considérons les filtres quantiques. Certaines méthodes issues de la théorie des probabilités ainsi que les techniques de Lyapounov stochastiques nous permettent d'étudier la stabilisation globale de ces modèles.

Abstract

Key words : Non-linear control, Quantum systems, Schrödinger equation, Lindblad equation, Quantum filter equations, Controllability, Lyapunov based techniques, Identification, Numerical methods, Stochastic control, Quantum feedback.

In this thesis, we consider three different classes of models coming from the literature on quantum systems.

Schrödinger equation at a first step we consider a Schrödinger equation where the control term comes up in a bilinear manner : $i\frac{d}{dt}\Psi(t) = H_0\Psi(t) + u(t)H_1\Psi(t)$. We treat then three major questions on the system :

Controllability the controllability issue has already been completely explored in finite dimensional configurations. Nevertheless, for the infinite dimensional case much less results are available up to now. In this direction we consider the controllability of the quantum harmonic oscillators. It is shown that the only controllable part of such a system corresponds to the classical dynamics of the average position and momentum. This result is then generalized to the quantum electro-dynamics in a cavity. A control theoretic interpretation of a known result in physics is then provided. The result says that classical currents and sources only generate classical light (quasi-classical states of the field).

Trajectory generation Once the controllability problem is solved the main issue becomes actually how to generate trajectories for the system. We consider some Lyapunov based approaches for the generation of open-loop trajectories. In the finite dimensional case, convergence is precisely analyzed. Whenever the linearized system around the reference trajectory is controllable ensures almost global asymptotic convergence. In the critical case where this linearized system is not controllable two approaches are then suggested. The first one, based on the adiabatic theory for quantum systems, provide, under some much weaker assumptions, an approximate control result. The second one uses an implicit Lyapunov method and ensures the almost global stabilization around the reference trajectory under these weaker assumptions. These methods have been

tested numerically on the test cases coming directly from quantum chemistry literature.

Hamiltonian identification Another issue in this context is to inverse the laboratory data for a quantum system in order to recognize the unknown parameters of a partially known physical system. The available data are observations as a function of time corresponding to dynamics generated by electric fields. The well-posedness of the problem is proved, mainly focusing on the uniqueness of the solution. A numerical approach is also introduced with an illustration of its efficiency on a test problem

Lindblad equation we consider a statistic ensemble of quantum systems whose average evolution is described by a master equation of Lindblad type. We assume that the decoherence term is due to a highly unstable excited state. We measure then the photons spontaneously emitted. In the case where the other states does not admit any decoherence and when we consider the effect of resonant laser fields, we can eliminate the fast dynamics associated to the excited state in order to obtain a master equation for slow part. We show that this master equation is still of Lindblad type. In this slow master equation, the decoherence appears as a second order term. The associated measure depends explicitly on the laser field, which can be adjusted to give information on a specific linear combination of the density matrix coefficients. A 3-dimensional case is treated before the general case. For the case of this 3-level system, we show how a simple PI regulator allows us to robustly control the slow 2-level subsystem.

Stochastic models (quantum filters) No quantum measurement can give full information on the state of a quantum system; hence any quantum feedback control problem is necessarily one with partial observations, and can generally be converted into a completely observed control problem for an appropriate quantum filter as in classical stochastic control theory. Here we study the properties of controlled quantum filtering equations as classical stochastic differential equations. We then develop methods, using a combination of stochastic Lyapunov techniques, geometric control and classical probabilistic techniques, for global feedback stabilization of a class of quantum filters around a particular eigenstate of the measurement operator.

Table des matières

Introduction	13
1 Contrôlabilité	19
1.1 Contrôlabilité des oscillateurs harmoniques quantiques	20
1.1.1 Cas uni-dimensionnel	21
1.1.2 Cas de dimension n	23
1.1.3 Particule dans un puits de potentiel en mouvement	24
1.2 Champs électromagnétiques et sources classiques	25
1.2.1 Nouvelle formulation pour le problème des oscillateurs	25
1.2.2 Cavité avec des sources classiques de courant	26
1.3 Modèle de Jaynes-Cummings avec contrôle	28
1.4 Contrôle des ions piégés par laser	30
2 Génération de trajectoires	33
2.1 Contrôle Lyapounov	34
2.1.1 Dynamiques et phase globale	35
2.1.2 Contrôle Lyapounov	35
2.1.3 Exemples et simulations	36
2.1.4 Analyse de convergence	38
2.1.5 Suivi de trajectoires pour les références adiabatiques	43
2.2 Suivi de trajectoires	46
2.3 Modèles de la chimie quantique	50
2.3.1 Problème de contrôle et méthode de Lyapounov	50
2.3.2 Simulations numériques	54
2.3.3 Un algorithme monotone	58
2.4 Stabilisation sous les hypothèses relaxées	60
2.4.1 État cible isolé	62
2.4.2 Analyse de convergence	65
2.4.3 Cas dégénéré	67
2.4.4 Simulations numériques	67
2.5 Discussions pour le cas de dimension infinie	68

3	Identification de l'Hamiltonien	77
3.1	Unicité	79
3.1.1	S1 : Hamiltonien connu et moment dipolaire inconnu	79
3.1.2	S2 : l'Hamiltonien et le moment dipolaire inconnus	83
3.2	Vers un algorithme numérique	91
3.2.1	Identification optimale	91
3.2.2	Étape d'inversion	92
3.2.3	Étape de la sélection du contrôle	93
3.2.4	Illustration numérique	93
4	Mesure continue d'un ensemble statistique	97
4.1	Système à 3 états	98
4.1.1	Approximation des champs tournants	99
4.1.2	Approximation adiabatique	100
4.2	Un simple régulateur PI	102
4.3	Système de Lindblad lent/rapide	103
5	Stabilisation pour les modèles stochastiques	107
5.1	Contrôle par feedback d'un système à deux qubits	109
5.2	Filtres quantiques : les propriétés mathématiques	113
5.3	Systèmes du moment angulaire	118
5.4	Système à deux-qubits	129
	Conclusion	133
A	Contrôlabilité des systèmes quantiques	135
B	Systèmes lents/rapides	137
C	Lyapounov stochastiques	139
D	Théorème de support	141

Introduction

Les besoins de la science moderne et les demandes croissantes de la technologie ont conduit les recherches théoriques et expérimentales vers le contrôle des systèmes quantiques. Des applications diverses et fascinantes à la chimie, à la métrologie, aux réseaux optiques et à l'informatique ont motivé le développement de ce domaine.

Plusieurs groupes de recherche se sont intéressés à ces différents aspects. En France, les mathématiciens aussi bien que les physiciens ont fait des contributions. Parmi ces chercheurs, nous citons les équipes suivantes : l'équipe de S. Haroche (Laboratoire Kastler-Brossel, ENS Ulm), l'équipe de O. Atabek (Laboratoire de photophysique moléculaire du CNRS, Orsay), l'équipe de C. Le Bris (CERMICS, ENPC), l'équipe de Y. Maday (Laboratoire Jacques-Louis Lions, Paris VI), l'équipe de J.M. Coron (Département de mathématiques, Orsay), l'équipe de J.P. Puel (Laboratoire de Mathématiques Appliquées, Université de Versailles). Aux États-Unis, de nombreux chercheurs ont travaillé sur ce sujet, parmi lesquels nous citons seulement les chimistes dans l'équipe de H. Rabitz (Department of Chemistry, Princeton) et les physiciens du groupe de H. Mabuchi (Physical Measurement and Control group, Caltech).

Pour un panorama incluant différents points de vue sur ce sujet, nous invitons les lecteurs à voir les références [55, 76, 26, 107, 110, 82]. On trouvera aussi dans la thèse d'Eric Cancès ([28], Chapitre 1) une excellente introduction à la chimie quantique et dans les thèses de Gabriel Turinici ([127], Chapitre 3) et de Julien Salomon [112] une vue d'ensemble avec un exposé très pédagogique sur le contrôle en chimie quantique. Pour une introduction sur la décohérence quantique et son contrôle nous renvoyons le lecteur au cours de Serge Haroche au Collège de France [55]. Enfin, pour une introduction sur les aspects stochastiques et les filtres quantiques nous renvoyons le lecteur au papier résumant l'état de l'art [54].

Dans le domaine de la mécanique quantique, diverses classes de modèles de contrôle sont considérées. Dans cette thèse, nous abordons le contrôle de trois classes de modèles.

Les équations du type Schrödinger avec un contrôle constituent une première classe, la classe fondamentale. L'équation de Schrödinger caractérise l'évolution de la fonction d'onde Ψ , associée à une particule (ou à un ensemble de particules). Ψ l'état du système appartient à un espace de Hilbert. Les éléments principaux de ce type d'équation sont :

1. un Hamiltonien interne H_0 qui caractérise l'évolution du système en l'absence d'in-

- teraction avec l'environnement ;
2. un Hamiltonien d'interaction H_1 (par exemple, le moment dipolaire μ) via lequel le système est couplé à l'environnement ;
 3. un champ externe $u(t)$ (champ électromagnétique, laser, ...) qui agit sur le système à l'aide de l'Hamiltonien d'interaction H_1 ; ce champ scalaire $u(t)$ joue le rôle du contrôle.

Les Hamiltoniens H_0 et H_1 sont des opérateurs auto-adjoints définis sur l'espace d'états de la fonction d'onde Ψ . L'équation de Schrödinger est alors donnée par

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t) &= H_0 \Psi(t) + u(t) H_1 \Psi(t) \\ \Psi(t=0) &= \Psi_0, \quad \|\Psi_0\| = 1 \end{aligned} \quad (1)$$

où Ψ_0 est l'état initial du système. Une première observation est que cette équation conserve la norme de Ψ (conservation de la probabilité). C'est le modèle fondamental de la mécanique quantique où les phénomènes irréversibles de décohérence liée à l'environnement sont absents.

La deuxième classe de modèles correspond aux équations du type Lindblad. Ces équations caractérisent l'évolution de l'opérateur densité d'un ensemble statistique de systèmes. En fait, à une équation de Schrödinger, telle qu'elle est définie en (1), nous pouvons associer une équation dans le langage de l'opérateur densité. Un opérateur densité ρ est un opérateur non-négatif, auto-adjoint défini sur l'espace de Hilbert du système. Cet opérateur est supposé de trace 1. Dans le cas d'une équation de Schrödinger, la matrice $\rho(t) = \Psi(t)\Psi^*(t)$ (Ψ^* étant la conjuguée Hermitienne de Ψ) vérifie :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) &= [H_0 + u(t)H_1, \rho(t)] \\ \rho(t=0) &= \rho_0. \end{aligned} \quad (2)$$

Ici, $[A, B] = AB - BA$ désigne le commutateur de deux opérateurs. Lorsque nous ajoutons la décohérence induite par l'environnement, nous sommes obligés de modifier cette dynamique. Les fluctuations quantiques de l'environnement sont à la base de cette décohérence. Ce phénomène se traduit par des sauts quantiques d'un niveau d'énergie à un autre. Lorsque nous considérons un ensemble de systèmes identiquement préparés (avec les mêmes états initiaux), indépendants entre eux et qui évoluent selon la même dynamique, la contribution moyenne de ces sauts de nature stochastique peut être modélisée par une équation déterministe dite de Lindblad :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [H_0 + u(t)H_1, \rho(t)] + \sum_i (L_i \rho(t) L_i^* - \frac{1}{2} L_i^* L_i \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) L_i^* L_i) \quad (3)$$

$$\rho(t=0) = \rho_0. \quad (4)$$

Ici, les opérateurs L_i caractérisent ces sauts quantiques et en général ne sont pas auto-adjoints (L_i^* est la conjuguée Hermitienne de L_i). Le phénomène dissipatif apparaît lorsqu'on considère la quantité $\text{Tr}[\rho^2]$. Dans le cadre d'une équation de Schrödinger simple (l'équation (2)), cette quantité est conservée et est égale à 1 : $\text{Tr}[\rho^2] = \text{Tr}[\Psi\Psi^*\Psi\Psi^*] = \text{Tr}[\Psi\Psi^*] = \text{Tr}[\rho] = 1$. Tandis que pour l'équation du type Lindblad cette quantité est seulement inférieure ou égale à 1. Ainsi, nous ne pouvons pas espérer écrire l'opérateur densité $\rho(t)$, solution de (3), sous la forme $\rho = \Psi\Psi^*$ correspondant à un état pur.

Finalement, la troisième classe de modèles considérée dans cette thèse correspond aux équations des filtres quantiques. Lorsqu'on considère un seul système quantique dans son environnement avec les sauts quantiques induits par les fluctuations du vide, les mouvements stochastiques s'ajoutent à l'évolution moyenne. Pour les exemples considérés dans cette thèse ainsi que beaucoup d'autres systèmes physiques, ces sauts peuvent être approchés par des mouvements Browniens. Nous avons alors une première équation stochastique d'Itô dans le point de vue de Heisenberg. Il est difficile de résumer en quelques lignes cette équation, nous renvoyons le lecteur intéressé à [53]. Cette équation n'intègre pas le fait que l'on dispose de mesures. Ces mesures sont toujours partielles mais cependant elles peuvent être intégrées pour rendre notre connaissance du système plus précise. Pour cela, on utilise un filtre quantique qui donne l'espérance conditionnelle des observables à partir d'une matrice densité conditionnelle ρ_t . Elle est solution d'une autre équation stochastique d'Itô dont la partie déterministe est de type Lindblad. Dans le cas où la décohérence est uniquement due à la mesure associée à un unique opérateur de Lindblad L , ce filtre quantique admet la forme suivante :

$$d\rho_t = -i[H_0 + u(t) H_1, \rho_t]dt + (L\rho_t L^* - \frac{1}{2}(L^*L\rho_t + \rho_t L^*L))dt + \sqrt{\eta}(L\rho_t + \rho_t L^* - \text{Tr}[(L + L^*)\rho_t]\rho_t)dW_t. \quad (5)$$

où $0 < \eta \leq 1$ est l'efficacité du détecteur, et où le processus de Wiener W_t correspond à la mesure Y_t via la relation $dW_t = dY_t - \text{Tr}[(L + L^*)\rho_t]dt$. Ce filtre, initialement décrit par Belavkin [17], est l'analogue quantique de l'équation classique de Kushner-Stratonovich.

Pour le premier modèle (l'équation de Schrödinger), nous considérons tout d'abord le problème de contrôlabilité. La contrôlabilité d'un tel système, bi-linéaire, en dimension finie à été bien explorée. Mais, les résultats en dimension infinie restent très parcellaires. Dans cette thèse, nous nous concentrons surtout sur le cas de la dimension infinie. Pour des familles d'oscillateurs harmoniques, une interprétation en terme de contrôle d'un résultat bien connu des physiciens est donnée. De plus, nous traduisons deux problèmes physiques dans le langage des équations aux dérivées partielles avec contrôle. Nos résultats ont fait l'objet d'une publication (avec P. Rouchon) dans "IEEE Transactions in Automatic Control" parue en 2004 [90] ainsi que d'une communication (avec P. Rouchon) acceptée à la conférence "CDC/ECC" (décembre 2005, Seville) [94].

Le fait de savoir répondre à la question de la contrôlabilité, ne garantit pas la simplicité de la génération de trajectoires. Toute une classe de méthodes géométriques (voir

les travaux dus à A. Agrachev, C. Altafini, U. Boscain, T. Chambrion, ...) ainsi que de techniques numériques (voir les travaux dus à H. Rabitz, C. Le Bris, Y. Maday, G. Turinici, ...) ont été appliquées pour répondre à ce problème de façon optimale. Dans cette thèse, nous considérons une autre alternative, facile à calculer numériquement, et utilisant les techniques de stabilisation par feedback pour générer numériquement des trajectoires allant d'un état vers un autre. Une étude fine de la convergence de ces algorithmes de planification de trajectoires est également fournie. Ces contributions ont fait l'objet d'une publication (avec P. Rouchon et G. Turinici) à paraître dans "Automatica" (Novembre 2005) [95], d'une publication (avec G. Turinici et P. Rouchon) parue dans "Journal of Physical Chemistry :A" [96], ainsi que d'une publication en cours (avec K. Beauchard, J.M. Coron et P. Rouchon).

Poursuivant l'étude du modèle de Schrödinger, nous nous intéressons au cas où les Hamiltoniens H_0 ou H_1 ne sont que partiellement connus. Le contrôle $u(t)$ peut alors constituer un outil pour les identifier. Nous supposons qu'une mesure des populations $|\Psi_i|^2(t) = |\langle \Psi(t), e_i \rangle|^2$ est fournie par le laboratoire. Ici, les vecteurs e_i sont les éléments d'une base orthonormée. Le problème revient à trouver des contrôles suffisamment discriminants, permettant d'inverser les mesures et donc de retrouver les Hamiltoniens. Les chimistes ont été les premiers à poser et à étudier ce problème d'un intérêt pratique considérable. Nous mettons en évidence les fondements mathématiques de ce problème inverse, en particulier les liens étroits qu'il entretient avec le concept de la contrôlabilité. Enfin, nous proposons un algorithme numérique de résolution partiellement efficace. Ces contributions font l'objet d'une publication en cours (avec C. Le Bris, G. Turinici et H. Rabitz) soumise à "ESAIM : Control, Optimization and Calculus of Variations" [77].

Concernant la deuxième classe de modèles (équations déterministes du type Lindblad), notre contribution se limite à réduire le modèle lorsque certaines hypothèses sur les durées de vie atomiques sont vérifiées. Pour ce faire nous appliquons la méthode des perturbations singulières pour éliminer les dynamiques rapides (approximation dite adiabatique). L'équation étant définie sur les matrices, nous travaillons avec des objets non-commutatifs. Cette réduction de modèle nous permet de comprendre sous quelles conditions il est possible de considérer une équation de Schrödinger avec des mesures continues comme pour le problème d'identification évoqué précédemment.

La troisième classe de modèles concerne les filtres quantiques. Nous reprenons ici certains travaux très récents des physiciens du Caltech (H. Mabuchi et ses collaborateurs). En s'inspirant des techniques utilisées pour la contrôlabilité et la génération de trajectoires sur l'équation de Schrödinger bi-linéaire, nous exhibons une loi de feedback qui stabilise l'équation du filtre autour d'un état propre de l'opérateur de la mesure. Ainsi cette loi de feedback peut fournir une méthode fiable pour préparer un système dans des états bien particuliers et difficiles à obtenir. La loi de feedback s'exprime très simplement en fonction de ρ_t , la matrice densité conditionnelle. Cependant en pratique, il faut calculer ρ_t en temps réel, ce qui n'est pas évident avec les moyens actuels de calculs. Les seules expériences similaires de feedback comme celle rapportée dans [48] utilisent une simple loi

proportionnelle ne nécessitant que très peu de puissance de calcul. Une possibilité serait de simplifier l'équation du filtre en réduisant sa taille. Les résultats numériques et théoriques obtenus sur ce sujet font l'objet d'une publication en cours (avec R. Van Handel) soumise à "SIAM Journal of Applied Mathematics" [88] ainsi que d'une publication en cours de rédaction [89].

Voici une description rapide du contenu de cette thèse.

Chapitre 1 Ce chapitre aborde la contrôlabilité de certaines équations de Schrödinger en dimension infinie. Pour des équations du type oscillateurs harmoniques avec contrôle, nous étudions la séparation des parties contrôlable et non-contrôlable [90, 94]. Malgré une apparente simplicité, cette nouvelle approche nous permet de mieux comprendre l'origine de la non-commandabilité. Elle présente donc un intérêt non-négligeable pour l'étude des systèmes plus compliqués. Une autre contribution de ce chapitre consiste à présenter deux modèles réduits issus d'exemples physiques : le modèle de Jaynes et Cummings d'un spin $1/2$ couplé à un mode résonnant dans une cavité de grande finesse ; la dynamique des ions piégés. Leur contrôlabilité n'est pas abordée en détail, mais elle pourrait constituer un prolongement naturel des résultats de ce chapitre.

Chapitre 2 Ce chapitre porte sur la génération de trajectoires pour les équations de Schrödinger : trouver un contrôle en boucle ouverte $t \mapsto u(t)$ qui amène le système d'un état vers un autre. Nous proposons d'utiliser des lois de feedback issues d'une synthèse Lyapunov pour trouver des contrôles en boucle ouverte résultant de simulations numériques en boucle fermée. Une étude précise de la convergence de telles méthodes pour les équations de Schrödinger en dimension finie est faite. Elle va de la simple classe des systèmes non-dégénérés où le linéaire tangent est contrôlable, à des systèmes contrôlables mais hautement dégénérés. Nous montrons la pertinence de cette approche en calculant des contrôles en boucles ouvertes pour des systèmes connus par les chimistes comme difficiles. A la fin de ce chapitre, nous abordons la généralisation à la dimension infinie sans toutefois pouvoir la traiter de manière complètement satisfaisante.

Chapitre 3 Ce chapitre porte sur l'identification de l'Hamiltonien intervenant dans l'équation de Schrödinger à partir d'une mesure continue des populations. Nous proposons ici les premiers résultats théoriques garantissant le caractère bien posé de ce problème inverse en montrant le rôle clé que joue le contrôle au niveau de la qualité de l'inversion. Nous proposons aussi une illustration numérique dans le cas simple d'un système à 4 états.

Chapitre 4 Ce chapitre montre, en partant d'un modèle déterministe sous forme de Lindblad, comment il est possible, moyennant des hypothèses sur les échelles de temps, d'avoir des mesures en continu sans pour autant perturber notablement le système. Ce dernier peut alors obéir à une dynamique de type Schrödinger sur un sous-espace, la variété

lente du système. Physiquement, il s'agit d'un ensemble statistique de systèmes, identiquement préparés à l'instant initial. La dynamique de la relaxation due à l'observation est supposée beaucoup plus rapide que les dynamiques naturelles. Nous montrons comment obtenir la dynamique lente en utilisant les techniques de perturbations singulières et de variétés centres, techniques qui s'adaptent sans difficulté au cadre non-commutatif de l'équation différentielle matricielle satisfaite par l'opérateur densité.

Chapitre 5 Ce chapitre considère le contrôle par feedback de système de la troisième classe. En collaboration avec R. Van Handel et à la suite de ses travaux avec J.K. Stockton et H. Mabuchi [54], nous étudions ici la stabilisation d'un système unique (système du moment angulaire) lorsque la relaxation due au phénomène de la mesure est prise en compte de façon continue. Ce problème de stabilisation par feedback d'un système quantique [53, 54] est alors très proche du contrôle stochastique classique lorsque les observations ne sont que partielles [19]. Nous considérons ici l'équation du filtre comme point de départ, et nous étudions sa stabilisation par feedback fondée sur une synthèse Lyapounov stochastique. Nous montrons comment une modification (facile à mettre en oeuvre et faisant apparaître une discontinuité) de la loi obtenue par synthèse Lyapounov assure la stabilisation globale. Des simulations illustrent l'intérêt de ce feedback. Une étude mathématique assure la convergence de la méthode dans le cas où la zone de discontinuité est remplacée par une zone plus large avec hystérésis.

Conclusion La thèse se termine par quelques pages où nous proposons des extensions naturelles aux résultats décrits dans les cinq chapitres évoqués ci-dessus.

Appendices L'Annexe A a pour but de donner quelques résultats bien connus de contrôlabilité pour les équations de Schrödinger bi-linéaires surtout dans le cas de dimension finie. Dans l'annexe B nous présentons la technique des perturbations singulières utilisée pour l'analyse du Chapitre 4. Finalement, les annexes C et D développent deux classes d'outils importants pour l'analyse des équations différentielles stochastiques. La première étend les méthodes du type Lyapounov au cas des systèmes stochastiques et la deuxième introduit le théorème de support. Lors de l'étude des systèmes stochastiques, ce dernier théorème nous permet parfois de nous ramener au cas d'une équation différentielle déterministe.

Chapitre 1

Contrôlabilité

Bien que la contrôlabilité des systèmes quantiques de dimension finie soit un sujet déjà bien exploré, elle reste toujours un domaine actif de recherches [1, 3, 24, 109, 123, 131]. Certains des résultats principaux correspondant à ces travaux sont présentés dans l'Annexe A.

Le problème de contrôlabilité d'un système de dimension infinie est nettement plus dur, d'autant plus que le système est non-linéaire (bi-linéaire). Notons qu'il ne suffit pas d'avoir la contrôlabilité de toutes les approximations modales de dimension finie, pour assurer la contrôlabilité du système original de dimension infinie, comme le montre le cas de l'oscillateur harmonique quantique traité dans la Section 1.1. Nous traitons le problème sur une classe particulière. Des travaux portants sur d'autres classes peuvent être trouvés dans [29], [14], [137] et [15].

Dans la Section 1.1, nous étudions la contrôlabilité des oscillateurs harmoniques quantiques. Nous verrons que le fait que toutes les approximations modales d'un oscillateur quantique uni-dimensionnel soient contrôlables ne suffit pas à rendre le système contrôlable. De plus, nous caractérisons les parties contrôlable et non-contrôlable du système. Ensuite, nous généralisons le résultat au cas n -dimensionnel avec m contrôles. Finalement la sous-section 1.1.3 est consacrée à l'étude d'une particule dans un puits de potentiel en mouvement. Nous verrons que malgré ces résultats de non-contrôlabilité, il est possible de résoudre à l'aide des calculs élémentaires, quelques problèmes de planification de trajectoires admettant des interprétations physiques simples.

Dans la section 1.2, nous re-formulons le résultat de la Section 1.1 en utilisant la formulation d'Heisenberg, les transformations unitaires dues à Glauber et les opérateurs d'annihilation et de création. Ensuite, nous adaptons cette formulation pour pouvoir traiter le modèle plus compliqué d'un champ électromagnétique dans une cavité vide où la source de contrôle est supposée classique. Nous proposons une interprétation en terme de contrôle du résultat bien connu : "les sources classiques de courants génèrent uniquement des lumières classiques" (états quasi-classiques du champ)(voir par exemple [33][complément B_{III} , page 217]).

Pour surmonter ce problème de non-contrôlabilité des degrés de liberté quantiques, on doit ajouter des sources quantiques au système. Une première idée consiste à coupler le système avec une dynamique quantique localisée. Le modèle de Jaynes-Cummings [60] et le modèle vibrationnel des ions piégés [55] sont deux modèles fondamentaux de cette forme. Nous introduisons ces modèles dans les Sections 1.3 et 1.4 : nous présentons les approximations principales et les domaines de validité de ces modèles. Finalement, nous proposons les versions EDP de ces systèmes et de plus, nous formulons les problèmes de contrôlabilité. Ces études font suite aux travaux menés par Brockett et. al. [25] où pour le système des ions piégés, un modèle d'ordre 1 en terme de paramètre de Lamb-Dicke est étudié.

L'étude de la contrôlabilité de ces deux modèles n'a pas été abordée pendant cette thèse, mais constituera vraisemblablement un sujet intéressant pour des futures recherches. Comme les systèmes linearisés ne sont pas contrôlables, une piste pourrait être d'avoir recours à la méthode du retour due à J.M. Coron [36, 37, 15].

Les résultats de ce chapitre ont fait l'objet d'une communication acceptée à la conférence "CDC/ECC" (décembre 2005, Seville) [94] ainsi que d'une publication dans "IEEE Transactions on Automatic control" parue en 2004 [90].

1.1 Contrôlabilité des oscillateurs harmoniques quantiques

Schirmer et al. ont considéré pour un entier $n > 0$, l'équation de Schrödinger suivante (l'état $\psi \in \mathbb{C}^{n+1}$ et le contrôle $u \in \mathbb{R}$)

$$i \frac{d}{dt} \psi = (H_0 + uH_1) \psi$$

où H_0 et H_1 sont des matrices Hermitiennes $(n+1) \times (n+1)$:

$$H_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & & \\ & 0 & \frac{5}{2} & \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & & \frac{2n+1}{2} \end{pmatrix}, \quad H_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & \ddots & & \vdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & & \vdots \\ \vdots & & \sqrt{3} & & \ddots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \sqrt{n+1} \\ 0 & \dots & & 0 & \sqrt{n+1} & 0 \end{pmatrix}.$$

En utilisant le résultat général de contrôlabilité de [109], ils ont montré que ce système de dimension finie est contrôlable [113]. Un tel système est une approximation modale de l'oscillateur harmonique

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left(\frac{1}{2} x^2 - u(t)x \right) \psi \quad (1.1)$$

où $\psi(t, x) \in \mathbb{C}$ est fonction de $x \in \mathbb{R}$ et de $t \in \mathbb{R}^+$. Nous montrons qu'un tel système n'est pas contrôlable : la partie contrôlable correspond à la dynamique de la valeur moyenne de la position, $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(t, x)|^2 x dx$, (cette dynamique prend la forme d'un oscillateur harmonique classique) :

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\langle x \rangle + u.$$

Pour l'approximation modale de dimension $n + 1$, la relation de commutation $[x, p] = i$ n'est pas vérifiée, ce qui aboutit à une algèbre de Lie de contrôlabilité pleine. Mais dans le cas de dimension infinie, cette algèbre de Lie est seulement de dimension 4.

La partie non-contrôlable correspond à une équation de Schrödinger autonome que nous caractérisons dans la Section 1.1.1.

Cette décomposition se généralise facilement au cas d'un espace de dimension arbitraire n avec m contrôles :

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{1}{2} \Delta \psi = \frac{1}{2} (Ax, x)_{\mathbb{R}^n} \psi - \sum_{i=1}^m u_i (b_i, x)_{\mathbb{R}^n} \psi \quad (1.2)$$

où $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \ni (t, x) \mapsto \psi(t, x) \in \mathbb{C}$ est l'amplitude de probabilité, $\Delta = \sum_{i=1}^n (\partial^2)/(\partial x_i^2)$ est l'opérateur de Laplace dans \mathbb{R}^n , A est une matrice symétrique de taille $n \times n$, $\{b_i\}_{i=1}^m$ est un ensemble de vecteurs dans \mathbb{R}^n et $(\cdot, \cdot)_{\mathbb{R}^n}$ est le produit scalaire dans \mathbb{R}^n .

Même si ce fort manque de contrôlabilité laisse présager des obstructions sévères pour le contrôle des oscillateurs quantiques, la situation n'est pas si décevante. Supposons que le contrôle u correspond à une accélération $-u = \ddot{\varrho}$. Alors, (1.1) peut être interprétée comme l'équation de Schrödinger régissant le mouvement d'une particule dans un repère non-Galiléen se déplaçant avec une accélération $\ddot{\varrho}$. Le contrôle est donc directement lié à la position absolue de ce repère ϱ et l'interprétation physique devient claire : la particule est piégée dans un puits décrit par le potentiel quadratique $x^2/2$. Le puits étant en mouvement, le contrôle est la position de ce puits. La configuration est très similaire à un problème classique : le problème de contrôle d'une gamelle d'eau en mouvement. La particule joue le rôle de l'eau avec ses vagues. Le potentiel quadratique correspond alors à la gamelle contenant l'eau. Nous avons donc des propriétés de contrôlabilité similaires à celles obtenues dans [100] : pour a et b arbitrairement choisis, nous explicitons le contrôle $t \mapsto u(t)$ amenant le système (1.1), de la position initiale a à la position b au temps $t = T$. Ce contrôle est fait pour conserver, à un changement de phase près, Ψ_n le niveau d'énergie. Notons que ce changement est global est donc n'influence pas l'état physique du système.

1.1.1 Cas uni-dimensionnel

Notons par $p = -i(\partial)/(\partial x)$ l'opérateur d'impulsion et x la multiplication par x . Alors, (1.1) s'écrit

$$i \frac{d}{dt} \psi = \frac{1}{2} (p^2 + x^2) \psi - ux \psi = H_0 \psi + u H_1 \psi$$

où $H_0 = (1/2)(p^2 + x^2)$ et $H_1 = -x$. En s'inspirant de [109] nous caractérisons l'algèbre de Lie engendrée par iH_0 et iH_1 à l'aide des relations de commutation standards : pour toute fonction F , $[x, p] = i$, $[x, F(p)] = iF'(p)$, et $[F(x), p] = iF'(x)$. Nous avons

$$[H_0, H_1] = ip \quad [H_0, p] = -ix \quad [H_1, p] = -i.$$

Donc, l'algèbre de Lie est de dimension 4 et le système n'est pas contrôlable.

En fait, la partie contrôlable coïncide avec la dynamique de la valeur moyenne de la position $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(t, x)|^2 dx$. Cette dynamique est donnée par le théorème classique d'Ehrenfest (voir, par exemple, [87]) et correspond à celle d'un oscillateur classique

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle \quad \langle p \rangle = -\langle x \rangle + u \quad (1.3)$$

ce qui est évidemment contrôlable.

La partie non-contrôlable correspond à une équation de Schrödinger sans contrôle. Considérons le changement de variable suivant $(t, x) \mapsto (t, z = x - \langle x \rangle)$. L'équation de Schrödinger avec $\psi(t, x) = \exp(i \langle p \rangle z) \phi(t, z)$ s'écrit

$$i \frac{d}{dt} \phi = (P^2/2 + Z^2/2) \phi + (\langle x \rangle^2/2 - \langle p \rangle^2/2 - u \langle x \rangle) \phi$$

où $P \equiv i(\partial)/(\partial z)$ et $Z \equiv z$. Le changement de phase globale :

$$\phi(t, z) = \exp \left(-i \int_0^t (\langle x \rangle^2/2 - \langle p \rangle^2/2 - u \langle x \rangle) \right) \varphi(t, z)$$

(une transformation de gauge, puisque les fonctions d'onde ϕ et φ représentent les mêmes états physiques) implique l'équation

$$i \frac{d}{dt} \varphi = (P^2/2 + Z^2/2) \varphi. \quad (1.4)$$

La dynamique de $\psi(t, x)$ se décompose en deux parties, une partie contrôlable de dimension deux (1.3) et une partie non-contrôlable de dimension infinie (1.4).

Ces calculs sont classiques (voir, par exemple, [27]). Ce qui est moins classique est la décomposition en parties contrôlable et non-contrôlable, qui est l'analogue de la décomposition du système non-linéaire $(d)(dt)\xi = f(\xi, u)$ via un changement de coordonnées, non-linéaire, $\xi \mapsto \chi$ (voir, par exemple, [58]) où

$$\chi = (\chi_1, \chi_2) \quad \frac{d}{dt} \chi_1 = g_1(\chi_1) \quad \frac{d}{dt} \chi_2 = g_2(\chi_1, \chi_2, u).$$

La partie non-contrôlable correspond à la dynamique autonome de χ_1 . La question suivante devient donc naturelle. Considérons l'équation de Schrödinger (infini-dimensionnelle) avec les opérateurs Hermitiens généraux H_0 et $\{H_j\}_{j=1}^m$

$$i \frac{d}{dt} \psi = \left(H_0 + \sum_{j=1}^m u_j H_j \right) \psi.$$

Supposons l'algèbre de Lie engendrée par les opérateurs anti-Hermitiens H_0/i et $\{H_j\}_{j=1}^m$ de dimension finie. Est-ce qu'il existe une décomposition en deux parties, l'une contrôlable de dimension finie et l'autre non contrôlable de dimension infinie, similaire au cas où $H_0 = p^2/2 + x^2/2$ et $H_1 = -x$?

1.1.2 Cas de dimension n

Le résultat de la sous-section précédente se généralise facilement à la configuration où l'espace est de dimension arbitraire n avec m contrôles.

Considérons (1.2). En utilisant le théorème d'Ehrenfest, nous avons

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = -A \langle x \rangle + Bu \quad (1.5)$$

où $B = (b_1, \dots, b_m)$. $\langle x \rangle \in \mathbb{R}^n$ et $\langle p \rangle \in \mathbb{R}^n$ sont les valeurs moyennes de la position et de l'impulsion. La contrôlabilité de ce système de dimension finie est caractérisée par le rang de la matrice de contrôlabilité de Kalman [63]. Ce système est contrôlable si et seulement si $\text{rang}(B, AB, \dots, A^{n-1}B) = n$.

Nous considérons le changement de variables $(t, x) \mapsto (t, z = x - \langle x \rangle)$ avec

$$\psi(t, x) = \exp(i \langle \langle p \rangle, z \rangle_{\mathbb{R}^n}) \phi(t, z).$$

Ainsi, (1.2) devient

$$i \frac{d}{dt} \phi = \left(\frac{P^2}{2} + \frac{1}{2} (AZ, Z)_{\mathbb{R}^n} \right) \phi + \left(\frac{1}{2} (A \langle x \rangle, \langle x \rangle)_{\mathbb{R}^n} - \frac{1}{2} \langle p \rangle^2 - (Bu, \langle x \rangle)_{\mathbb{R}^n} \right) \phi$$

où $P = i((\partial)/(\partial z_1), \dots, (\partial)/(\partial z_n))$ et $Z = (z_1, \dots, z_n)$. Utilisons maintenant la transformation de gauge

$$\phi(t, z) = \exp \left(-i \int \left(\frac{1}{2} (A \langle x \rangle, \langle x \rangle)_{\mathbb{R}^n} - \frac{1}{2} \langle p \rangle^2 - (Bu, \langle x \rangle)_{\mathbb{R}^n} \right) dt \right) \varphi(t, z)$$

où φ vérifie l'équation autonome

$$i \frac{d}{dt} \varphi = \left(\frac{P^2}{2} + \frac{1}{2} (AZ, Z)_{\mathbb{R}^n} \right) \varphi.$$

En bref : la partie contrôlable de (1.2) correspond à la partie contrôlable du système linéaire de dimension $2n$ (1.5). Sa dimension est le double du rang de la matrice de Kalman $(B, AB, \dots, A^{n-1}B)$.

1.1.3 Particule dans un puits de potentiel en mouvement

Prenons le système (1.1) avec le contrôle $u = -\ddot{\varrho}$ où ϱ est la position du repère non-Galiléen associé à x . Nous considérons, de plus, le système de dimension finie

$$\langle \ddot{x} \rangle = -\langle x \rangle + u \quad \ddot{\varrho} = -u.$$

Ce système est contrôlable et admet $y = \varrho + \langle x \rangle$, la position moyenne dans le repère Galiléen, comme sortie de Brunovsky [63]

$$\langle x \rangle = -\ddot{y} \quad \varrho = y + \ddot{y} \quad u = \ddot{y} + y^{(4)}.$$

Supposons alors que notre but est d'amener la particule à partir d'une position moyenne a à une autre position moyenne b en un temps fini $T > 0$. Supposons que l'état initial $\psi(0, x)$ est un état stationnaire $\psi_n(x)$ d'énergie $n + 1/2$, $n \in \mathbb{N}$. Notre but est également de ramener le système à son niveau d'énergie initiale en fin d'évolution. Pour générer une trajectoire régulière, il suffit d'utiliser la méthode des systèmes plats [43, 44].

Nous considérons

$$u = \ddot{\zeta} + \zeta^{(4)}$$

où ζ est une fonction C^4 du temps avec $\zeta(0) = a$, $\zeta(T) = b$, et $\zeta^{(i)}(0) = \zeta^{(i)}(T) = 0$, pour $i = 1, 2, 3, 4$. On peut par exemple choisir

$$\zeta(t) = \frac{a(1 - \frac{t}{T})^\alpha + b(\frac{t}{T})^\alpha}{(1 - \frac{t}{T})^\alpha + (\frac{t}{T})^\alpha}, \quad t \in [0, T]$$

avec $\alpha \geq 4$. Grâce à la décomposition en parties contrôlable et non-contrôlable, (1.3) et (1.4), la solution de (1.1) avec $\psi(0, x) = \psi_n(x)$ et $u(t) = \ddot{\zeta}(t) + \zeta^{(4)}(t)$ est explicite. Pour $t \in [0, T]$, la solution $\psi(t, x)$ est donnée par

$$\exp \left[-i \left(\frac{(2n+1)t}{2} + \zeta^{(3)}(x + \zeta) + \int_0^t \left(\frac{\dot{\zeta}^2}{2} - \frac{(\zeta^{(3)})^2}{2} + (\ddot{\zeta} + \zeta^{(4)}) \zeta \right) \right) \right] \psi_n(x + \zeta).$$

Ce résultat découle directement de la sous-section 1.1.1 car

$$\langle x \rangle = -\ddot{\zeta} \quad \langle p \rangle = -\zeta^{(3)}.$$

Comme nous avons aussi $\varrho = \zeta + \ddot{\zeta}$, nous déduisons qu'un tel contrôle en boucle ouverte amène la particule de la position moyenne a à la position moyenne b sans changer son énergie. Le temps de transition T peut être arbitrairement court. En revanche, le contrôle u peut être très grand. En utilisant le résultat de la sous-section 1.1.2, cette méthode nous permet de générer les trajectoires physiques dans \mathbb{R}^3 , correspondant au cas à n particules dans n puits de potentiel quadratiques, simultanément en mouvement.

1.2 Champs électromagnétiques et sources classiques

1.2.1 Nouvelle formulation pour le problème des oscillateurs

Dans cette sous-section, nous re-formulons le résultat de la section précédente en utilisant les opérateurs d'annihilation et de création. Nous allons tout simplement remplacer l'opérateur de position x par $\frac{a+a^\dagger}{\sqrt{2}}$ et l'opérateur d'impulsion p par $\frac{a-a^\dagger}{i\sqrt{2}}$, où

$$[a, a^\dagger] = 1.$$

L'évolution du système quantique est alors caractérisée par l'équation de Schrödinger

$$i\dot{\psi} = (H_0 + uH_1)\psi,$$

où $H_0 = a^\dagger a + \frac{1}{2}$ est l'Hamiltonien d'évolution libre et $H_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)$ est l'opérateur d'interaction.

Le but de cette sous-section est d'introduire une transformation unitaire dépendante du temps (correspondant à une translation contrôlable du système moyenné), permettant de séparer la partie non-contrôlable et de retrouver le résultat de la Section 1.1.

Considérons l'opérateur unitaire

$$T(t) = \exp[\langle a^\dagger \rangle a - \langle a \rangle a^\dagger]. \quad (1.6)$$

L'action de cette transformation unitaire sur l'opérateur a correspond à une translation par la quantité $\langle a \rangle$ (Théorème de Glauber) :

$$\begin{aligned} T(t)aT^\dagger(t) &= a + \langle a \rangle \\ T(t)a^\dagger T^\dagger(t) &= a^\dagger + \langle a^\dagger \rangle. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Prenant $\phi = T(t)\psi$, le système dans sa nouvelle représentation s'écrit

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}\phi &= \left(T(a^\dagger a + \frac{1}{2})T^\dagger - \frac{1}{\sqrt{2}}uT(a + a^\dagger)T^\dagger \right) \phi + \left(i\frac{dT}{dt} \right) T^\dagger \phi \\ &= \left[(a^\dagger + \langle a^\dagger \rangle)(a + \langle a \rangle) + \frac{1}{2} \right] \phi - \frac{u}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a + \langle a^\dagger \rangle + \langle a \rangle)\phi \\ &+ \left[(-\langle a^\dagger \rangle + \frac{u}{\sqrt{2}})a - (\langle a \rangle - \frac{u}{\sqrt{2}})a^\dagger \right] \phi \\ &= \left[a^\dagger a + \frac{1}{2} \right] \phi + \left[\langle a \rangle \langle a^\dagger \rangle - \frac{u}{\sqrt{2}}(\langle a \rangle + \langle a^\dagger \rangle) \right] \phi. \end{aligned}$$

Posons

$$S(t) = \exp \left(i \int^t \left[\langle a \rangle \langle a^\dagger \rangle - \frac{u}{\sqrt{2}}(\langle a \rangle + \langle a^\dagger \rangle) \right] dt \right).$$

On définit le changement de phase globale : $\varphi = S(t)\phi$. C'est une transformation unitaire, on obtient donc le système autonome suivant

$$i\dot{\varphi} = \left[a^\dagger a + \frac{1}{2} \right] \varphi.$$

Celui-ci correspond bien à la partie non-commandable du système et donc nous retrouvons le résultat de la section précédente.

1.2.2 Cavité avec des sources classiques de courant

Dans cette sous-section, nous appliquons la formulation de la sous-section précédente à un système physique plus complexe : un champ électromagnétique quantique dans une cavité $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ avec des sources classiques. Nous supposons que les sources sont imposées de l'extérieur : les courants j ne sont pas affectés par leur propre radiation. De plus, nous supposons que les sources sont macroscopiques et que nous pouvons donc négliger les fluctuations quantiques de courants autour de leurs valeurs moyennes. Ces hypothèses nous permettent d'estimer les courants quantiques $j(r)$ par des fonctions bien définies, $j(r, t)$ ($r \in \mathbb{R}^3$ est la variable spatiale). Cette sous-section est directement inspirée du complément B_{III} de [33].

Un champ électromagnétique quantique peut être modélisé par un ensemble d'opérateurs d'annihilation a_n . L'opérateur a_n correspond au n 'ième mode classique du champ électromagnétique et ω_n est sa fréquence associée. Nous avons les relations de commutation suivantes :

$$[a_n, a_k] = [a_n^\dagger, a_k^\dagger] = 0 \quad [a_n, a_k^\dagger] = \delta_{nk}$$

où δ_{nk} , l'indice de Kronecker, indique que les opérateurs de deux modes différents commutent.

Dans la formulation de Heisenberg, l'évolution du champ est régie par :

$$\dot{a}_n + i\omega_n a_n = j_n \tag{1.8}$$

où

$$j_n = \frac{i}{\sqrt{2}} \left\langle \frac{\partial j}{\partial t}, \phi_n \right\rangle_{L^2(\Omega)}$$

$\phi_n(r)$ étant le n 'ième mode de l'opérateur $-\Delta$ dans le domaine compact et régulier Ω avec les conditions de bords de Dirichlet. L'expression de l'Hamiltonien de ce système est

$$H = \sum_n \omega_n \left(a_n^\dagger a_n + \frac{1}{2} \right) - j_n (a_n + a_n^\dagger). \tag{1.9}$$

Formellement, l'état ψ appartient à un espace d'états construit à partir du produit tensoriel d'un nombre infini de copies de $L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})$: $\otimes_n L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})$. L'évolution du système est alors donnée par l'équation de Schrödinger bi-linéaire suivante

$$i\dot{\psi} = H\psi.$$

En utilisant le théorème d'Ehrenfest (ou l'équation (1.8)), la valeur moyenne du champ a pour dynamique :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle a_n + a_n^\dagger \rangle &= \frac{\omega_n}{i} \langle a_n - a_n^\dagger \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle a_n - a_n^\dagger \rangle &= \frac{\omega_n}{i} \langle a_n + a_n^\dagger \rangle - 2\frac{j_n}{i}.\end{aligned}\quad (1.10)$$

Les équations correspondent à l'évolution classique de la valeur moyenne des champs électrique et magnétique. Comme $-\omega_n^2$ est la n ème valeur propre de l'opérateur $-\Delta$ dans Ω avec les conditions de bords de Dirichlet, l'équation (1.10) est la projection sur le n 'ième mode de l'équation des ondes suivante :

$$\ddot{E} = \Delta E - \sqrt{2} \frac{\partial}{\partial t} j \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \quad (1.11)$$

avec les conditions de bords nulles. En fait, les équations de Maxwell suivantes représentent un modèle standard pour un champ électromagnétique classique dans un domaine borné par des conducteurs parfaits (un calcul simple montre que ces équations conduisent à l'équation des ondes (1.11)) :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot E(r, t) &= 0 \\ \nabla \cdot B(r, t) &= 0 \\ \nabla \times E(r, t) &= -\frac{\partial}{\partial t} B(r, t) \\ \nabla \times B(r, t) &= \frac{\partial}{\partial t} E(r, t) + \sqrt{2} j\end{aligned}\quad (1.12)$$

La contrôlabilité du système classique (1.11) où le contrôle apparaît comme une source localisé de courant j , à été déjà étudiée (voir par exemple [11, 134]).

Nous montrons que les dynamiques quantifiées de (1.11) (le contrôle j restant classique) ne sont pas contrôlables : on ne peut pas contrôler les fluctuations quantiques du champ électromagnétique à l'aide d'un contrôle classique.

Considérons la transformation unitaire suivante sur l'espace $\otimes_n L^2(\mathbb{R} : \mathbb{C})$:

$$T = \otimes_n T_n \quad (1.13)$$

où

$$T_n = \exp [\langle a_n^\dagger \rangle a_n - \langle a_n \rangle a_n^\dagger].$$

Nous avons (théorème de Glauber) :

$$T_n a_n T_n^\dagger = a_n + \langle a_n \rangle \quad T_k a_n T_k^\dagger = a_n \quad \text{pour } k \neq n.$$

En prenant $\phi = T(t)\psi$, exactement comme dans la sous-section précédente, nous obtenons :

$$i\dot{\phi} = \left[\sum_n \omega_n (a_n^\dagger a_n + \frac{1}{2}) \right] \phi + \left[\sum_n \omega_n \langle a_n \rangle \langle a_n^\dagger \rangle - j_n (\langle a_n \rangle + \langle a_n^\dagger \rangle) \right] \phi.$$

Finalement, en considérant $\varphi = S(t)\phi$ où

$$S(t) = \exp \left(i \int^t \left[\sum_n \omega_n \langle a_n \rangle \langle a_n^\dagger \rangle - j_n (\langle a_n \rangle + \langle a_n^\dagger \rangle) \right] dt \right)$$

est simplement un changement de phase globale et donc une transformation unitaire, nous obtenons l'équation de Schrödinger autonome suivante :

$$i\dot{\varphi} = \left[\sum_n \omega_n (a_n^\dagger a_n + \frac{1}{2}) \right]. \quad (1.14)$$

L'observable correspondant au champ électromagnétique est alors la somme de deux termes : sa valeur moyenne décrite par (1.11) (dont la contrôlabilité est assurée par les conditions suffisantes fournies dans [11]), et les fluctuations du vide décrites par (1.14) (qui ne sont pas contrôlables car leurs dynamiques sont complètement indépendantes du contrôle).

1.3 Modèle de Jaynes-Cummings avec contrôle

Comme nous avons vu dans la sous-section précédente, il n'est pas possible de contrôler les fluctuations quantiques d'un champ électromagnétique dans une cavité par des courants classiques. Il est alors nécessaire d'ajouter à l'intérieur de la cavité, des dynamiques quantiques localisées couplées au champ. Le modèle de Jaynes-Cummings est un des modèles les plus simples, décrivant le couplage d'un atome à deux niveaux avec une cavité électrodynamique : la fréquence de Bohr ω_b est proche de la fréquence d'un mode isolé de la cavité ω_c ($|\omega_b - \omega_c| \ll \omega_b$). L'espace d'états du système est donné par le produit tensoriel de l'espace d'états de dimension infinie d'un oscillateur harmonique, $L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})$, et celui de l'espace d'états de dimension deux de l'atome, \mathbb{C}^2 . Un tel espace est équivalent à $L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C}) \times L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})$. Notons $\psi = (\psi_g, \psi_e) \in L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C}) \times L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})$ l'état du système, il se décompose alors sur les vecteurs de base $|g\rangle$ et $|e\rangle$, respectivement l'état fondamental et excité du système, selon $\psi = \psi_g |g\rangle + \psi_e |e\rangle$. On suppose que le contrôle u est classique (courant classique ou lumière cohérente). Lorsqu'on considère un mode résonnant isolé de la cavité ($\omega_c \approx \omega_b$), l'Hamiltonien de la cavité peut s'écrire sous la forme

$$H_c = \omega_c a^\dagger a - u(a + a^\dagger).$$

L'Hamiltonien interne de l'atome est donné par :

$$H_a = \frac{\omega_b}{2} (|e\rangle \langle e| - |g\rangle \langle g|) = \frac{\omega_b}{2} \sigma_z$$

où σ_x, σ_y et σ_z sont les matrices de Pauli. Finalement, l'Hamiltonien d'interaction entre l'atome et la cavité est donné par :

$$H_{int} = \frac{\Omega}{2}(a + a^\dagger)(|e\rangle \langle g| + |g\rangle \langle e|) = \frac{\Omega}{2}(a + a^\dagger)\sigma_x$$

où Ω est la fréquence de Rabi du vide ($\Omega \ll \omega_c, \omega_b$). L'Hamiltonien du système est la somme de tous ces Hamiltoniens : $H_c + H_a + H_{int}$.

Une première simplification consiste à considérer l'approximation des champs tournants (dans le repère d'interaction). Prenons

$$\psi = \exp(-i\omega_b t a^\dagger a) \exp\left(-i\frac{\omega_b}{2} t \sigma_z\right) \phi.$$

Un calcul simple, utilisant la commutativité des opérateurs $a^\dagger a$ et aa^\dagger , montre que

$$\begin{aligned} \exp(i\omega_b t a^\dagger a) a \exp(-i\omega_b t a^\dagger a) &= e^{-i\omega_b t} a \\ \exp\left(i\frac{\omega_b}{2} t \sigma_z\right) \sigma_x \exp\left(-i\frac{\omega_b}{2} t \sigma_z\right) &= e^{-i\omega_b t} |g\rangle \langle e| + e^{i\omega_b t} |e\rangle \langle g|. \end{aligned}$$

Ces relations nous conduisent à une nouvelle formulation de l'Hamiltonien du système

$$H = (\omega_c - \omega_b) a^\dagger a - u(e^{-i\omega_b t} a + e^{i\omega_b t} a^\dagger) + \frac{\Omega}{2}(e^{-i\omega_b t} a + e^{i\omega_b t} a^\dagger)(e^{-i\omega_b t} |g\rangle \langle e| + e^{i\omega_b t} |e\rangle \langle g|).$$

Soit v une amplitude complexe lentement variable telle que $u = v e^{-i\omega_b t} + v^* e^{i\omega_b t}$, $v \in \mathbb{C}$ est désormais notre contrôle. En négligeant les termes oscillants $e^{\pm 2i\omega_b t}$, l'Hamiltonien de Jaynes-Cummings (dans le repère d'interaction) se réécrit :

$$H_{JC} = (\omega_c - \omega_b) a^\dagger a + \frac{\Omega}{2}(a |e\rangle \langle g| + a^\dagger |g\rangle \langle e|) - (v a^\dagger + v^* a).$$

$\omega_c - \omega_b$ est de même ordre de grandeur que Ω . Supposons maintenant que $\omega_c = \omega_b$. Dans le langage des EDP's, à un changement d'échelle près, nous avons le système suivant :

$$\begin{aligned} i\frac{\partial \psi_g}{\partial t} &= \left(v_1 x + i v_2 \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_g + \left(x + \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_e \\ i\frac{\partial \psi_e}{\partial t} &= \left(x - \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_g + \left(v_1 x + i v_2 \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_e. \end{aligned}$$

$v = v_1 + i v_2 \in \mathbb{C}$ est le contrôle. Une transformation unitaire similaire à celle de la sous-section 1.2.1 aboutit à une autre expression de ce problème de contrôle. Dans ce but nous prenons $w \in \mathbb{C}$ avec $i\frac{d}{dt}w = -v$ et nous considérons la transformation unitaire $T(t) = \exp[w^* a - w a^\dagger]$. En transformant le système, à un changement de phase globale près, nous obtenons la nouvelle expression :

$$\tilde{H}_{JC} = \frac{\Omega}{2} [(a + w) |e\rangle \langle g| + (a^\dagger + w^*) |g\rangle \langle e|].$$

$w \in \mathbb{C}$ est le nouveau contrôle correspondant à l'intégrale du contrôle physique v .

Dans la configuration EDP, à un changement d'échelle près, le système s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} i\frac{\partial\psi_g}{\partial t} &= \left(x + w_1 + \frac{\partial}{\partial x} + iw_2\right)\psi_e \\ i\frac{\partial\psi_e}{\partial t} &= \left(x + w_1 - \frac{\partial}{\partial x} - iw_2\right)\psi_g \end{aligned}$$

où $w = w_1 + iw_2 \in \mathbb{C}$.

Le modèle de Jaynes-Cummings est équivalent à

$$i\frac{d}{dt}\psi = (H_0 + w_1H_1 + w_2H_2)\psi$$

avec

$$H_0 = X\sigma_x - P\sigma_y, \quad H_1 = \sigma_x, \quad H_2 = \sigma_y$$

et

$$X = \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad P = \frac{a - a^\dagger}{i\sqrt{2}}.$$

L'algèbre de Lie engendrée par iH_0, iH_1 et iH_2 est maintenant de dimension infinie. Soient w_1 et w_2 deux constantes arbitraires, on peut montrer que le système linéaire tangent autour d'un état propre de $H_0 + w_1H_1 + w_2H_2$ n'est pas commandable. La contrôlabilité de ce système semble être un problème intéressant aussi bien de point de vue mathématique que de point de vue pratique.

1.4 Contrôle des ions piégés par laser

Nous évoquons maintenant le problème du contrôle des ions piégés par laser. On trouve une jolie présentation de ce système dans [55]. L'Hamiltonien du système est très similaire à celui présenté pour le modèle de Jaynes-Cummings :

$$H = \Omega(a^\dagger a + 1/2) + \frac{\omega_b}{2}(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|) + [ue^{i(\omega t - kX)} + u^*e^{-i(\omega t - kX)}](|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|)$$

avec $kX = \eta(a + a^\dagger)$. $\eta \ll 1$ est le paramètre de Lamb-Dicke. Ici, on agit sur le système via un laser dont la fréquence ω est en quasi-résonance avec les dynamiques internes ω_b : $\omega \approx \omega_b$. Le contrôle $u \in \mathbb{C}$ consiste en la modulation d'amplitude et de phase de ce laser. La fréquence de vibration Ω est beaucoup plus petite que ω et correspond à un potentiel harmonique dans lequel l'ion est piégé : $\Omega \ll \omega \approx \omega_b$.

En supposant $\omega = \omega_b$ et en prenant $\psi = \exp(-i\omega t\sigma_z/2)\phi$, l'Hamiltonien devient :

$$H = \Omega(a^\dagger a + 1/2) + \left[ue^{i(\omega t - \eta(a + a^\dagger))} + u^*e^{-i(\omega t - \eta(a + a^\dagger))}\right] (e^{-i\omega t}|g\rangle\langle e| + e^{i\omega t}|e\rangle\langle g|).$$

Finalement, à l'aide de l'approximation des champs tournants et en négligeant les termes de haute fréquence de la forme $e^{\pm 2i\omega t}$, nous obtenons l'Hamiltonien moyen suivant :

$$\tilde{H} = \Omega(a^\dagger a + 1/2) + ue^{-i\eta(a+a^\dagger)} |g\rangle \langle e| + u^* e^{i\eta(a+a^\dagger)} |e\rangle \langle g|.$$

L'Hamiltonien dans la configuration EDP correspond à l'équation d'évolution suivante :

$$\begin{aligned} i\frac{\partial\psi_g}{\partial t} &= \frac{\Omega}{2} \left(x^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi_g + ue^{-i\eta x} \psi_e \\ i\frac{\partial\psi_e}{\partial t} &= u^* e^{i\eta x} \psi_g + \frac{\Omega}{2} \left(x^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi_e. \end{aligned}$$

$u \in \mathbb{C}$ est le contrôle et $\eta \ll 1$. La contrôlabilité de ce système est un autre problème intéressant. L'article [25] mentionne ce problème dans le cas où $e^{i\eta x}$ est approché par $1 + i\eta x$.

Chapitre 2

Génération de trajectoires

Une fois la contrôlabilité du système quantique traitée, la question suivante est comment générer des trajectoires. Ce sujet a été développé théoriquement [26, 61, 104, 105, 110] aussi bien que par des expériences réelles [7, 9, 10, 20, 61, 78].

Pour les chimistes, la génération de trajectoires se résume souvent à la minimisation d'une fonction de coût qui décrit le but à atteindre et éventuellement les pénalisations à prendre en compte. Le fait que ce problème de minimisation soit bien posé a déjà été étudié dans différentes configurations [29, 14]. Trois méthodologies ont été utilisées dans la littérature : les approches itératives stochastiques (par exemple, les algorithmes génétiques) [47, 80], les méthodes itératives de point critique utilisant les informations de l'état adjoint et aboutissant aux algorithmes monotoniques [57, 83, 114, 125, 135] et les procédures locales du contrôle [31, 51, 67, 81, 97, 121, 122]. Cette dernière approche est appelée "tracking" en chimie quantique, ce qui ne correspond pas à la signification de "suivi de trajectoire" usuelle en théorie du contrôle.

Parmi ces différents résultats, Sugawara [121] a considéré une approche élémentaire du type Lyapounov mais l'a présentée comme une méthode de contrôle optimal, locale en temps. Elle assure la convergence asymptotique pour certains systèmes mais pas pour d'autres. Quelques résultats récents, toujours dans le cadre de l'application des méthodes de Lyapounov pour les systèmes quantiques peuvent être trouvés dans les références [50, 42] et [132].

Dans ce chapitre, nous fournissons une étude complète des techniques de Lyapounov. Différents systèmes quantiques dans des configurations variées sont considérés. Comme la mesure et le feedback pour les systèmes quantiques nécessitent des modèles et des dynamiques beaucoup plus compliqués qu'une simple équation de Schrödinger bi-linéaire (voir par exemple les chapitres 4 et 5), ces techniques de stabilisation sont utilisées ici uniquement pour la génération de trajectoires en boucle ouverte : en simulant le système en boucle fermée, nous obtenons un signal de contrôle qu'on pourra utiliser en boucle ouverte sur le système physique. Cette approche a été déjà utilisée par les chimistes dans le contexte du contrôle quantique.

Dans la Section 2.1 nous étudions les méthodes de Lyapounov pour l'équation de Schrödinger bi-linéaire en dimension finie. Nous exhibons la structure des contrôles trouvés grâce aux techniques de Lyapounov. Nous étudions la convergence des systèmes en boucle fermée. La Section 2.2 est consacrée à l'application de ces méthodes au suivi de trajectoires non-stationnaires. La Section 2.3 contient une étude heuristique des résultats obtenus dans les Section 2.1 et 2.2. Nous appliquons ces méthodes à des modèles bien connus de la chimie quantique. La Section 2.4, issue d'un travail commun avec K. Beauchard et J.M. Coron, présente une autre méthode de stabilisation qui traite les cas où les hypothèses de la Section 2.1 ne sont pas vérifiées. Finalement la Section 2.5 présente les résultats partiels, provenant une nouvelle fois d'un travail commun avec K. Beauchard. Nous ébauchons une étude de la stabilisation du système dans sa configuration EDP (dimension infinie). La technique de Lyapounov présentée dans la Section 2.1 se généralise facilement à cette configuration. Une preuve complète de la convergence manquant encore, nous continuons d'approfondir ce point.

Les résultats présentés dans la Section 2.1 de ce chapitre ont fait l'objet d'une communication à la conférence "NOLCOS" (Septembre 2004, Stuttgart) [91] et d'une publication à paraître dans "Automatica" (Novembre 2005) [95]. Le résultat de la Section 2.2 a été communiqué à la conférence "MTNS" (Juillet 2004, Leuven) [92]. Les résultats de la Section 2.3 ont été publiés dans le "Journal of Physical Chemistry : A" 2005 [96]. Le résultat de la Section 2.4, issu d'une collaboration avec K. Beauchard et J.M. Coron, sont soumise pour publication dans la revue "System and Control Letters" [16]. Finalement les résultats partiels de la Section 2.5 font l'objet de travaux en cours et sont issus de collaborations avec K. Beauchard.

2.1 Contrôle Lyapounov

Dans cette section nous appliquerons les méthodes du type Lyapounov à la stabilisation des systèmes quantiques. Comme il est précisé dans l'introduction, les techniques développées dans cette section peuvent seulement être utilisées pour générer des trajectoires en boucle ouverte. Néanmoins, les techniques présentées seront utiles pour élucider les problèmes liés à la structure de l'espace d'état. Elles peuvent aussi être considérées comme une première étape pour étudier la stabilisation de modèles plus réalistes incluant la vraie mesure et le vrai feedback.

Nous montrerons que la contrôlabilité du linéarisé tangent autour de la trajectoire de référence est une condition nécessaire pour la convergence asymptotique. L'analyse est fondée sur une adaptation aux systèmes quantiques bi-linéaires de la méthode générale proposée dans [62] (voir aussi [45]). De plus, nous proposerons un contrôle fictif additionnel ω , pour prendre en compte la phase globale du système (qui n'a physiquement aucun sens) et pour améliorer la convergence.

Cette section contient deux analyses de convergence, dont les résultats sont exprimés

par le Théorème 1, quand la trajectoire de référence est un état propre et donc stationnaire et par le Théorème 2, lorsque la trajectoire de référence est adiabatique.

Dans la sous-section 2.1.1, nous introduirons le contrôle fictif additionnel ω . Ensuite dans la sous-section 2.1.2 nous présenterons le terme de feedback trouvé par la méthode de Lyapounov. Dans la sous-section 2.1.3, nous commenterons les simulations illustrant les Théorèmes 1 et 2.

La sous-section 2.1.4 (resp. 2.1.5) est consacrée au Théorème 1 (resp. 2).

2.1.1 Dynamiques et phase globale

Prenons $i\frac{d}{dt}\Psi = (H_0 + u(t)H_1)\Psi$, un système quantique à n états où H_0 et H_1 sont des matrices Hermitien $n \times n$ à coefficients dans \mathbb{C} et $u(t) \in \mathbb{R}$ est un contrôle. La fonction d'onde $\Psi = (\Psi_i)_{i=1}^n$ est un vecteur dans \mathbb{C}^n , vérifiant $\sum_{i=1}^n |\Psi_i|^2 = 1$ et donc appartient à la sphère unité de \mathbb{C}^n , $\Psi \in \mathbb{S}^{2n-1}$. Les amplitudes de probabilités Ψ et $e^{i\theta(t)}\Psi$ représentent les mêmes états physiques pour toute phase globale $t \mapsto \theta(t) \in \mathbb{R}$. Cette propriété a des conséquences importantes sur la géométrie de l'espace d'états physiques : deux amplitudes de probabilité Ψ_1 et Ψ_2 s'identifient quand il existe un $\theta \in \mathbb{R}$ tel que $\Psi_1 = e^{i\theta}\Psi_2$. Pour prendre en compte cette géométrie non-triviale, nous ajoutons un deuxième contrôle ω correspondant à θ . Nous considérons donc le système suivant

$$i\frac{d}{dt}\Psi = (H_0 + uH_1 + \omega)\Psi \quad (2.1)$$

où $\omega \in \mathbb{R}$ est le nouveau contrôle qui joue le rôle du degré de liberté de gauge. Nous pouvons choisir sa valeur arbitrairement sans changer les quantités physiques attachées à Ψ . Avec un tel contrôle fictif ω , nous supposons dans la suite que l'espace d'états est tout simplement \mathbb{S}^{2n-1} et que les dynamiques données par (2.1) admettent deux contrôles indépendants u et ω .

2.1.2 Contrôle Lyapounov

Considérons la trajectoire de référence

$$t \mapsto (\Psi_r(t), u_r(t), \omega_r(t)),$$

une solution régulière de (2.1) : $i\frac{d}{dt}\Psi_r = (H_0 + u_r H_1 + \omega_r)\Psi_r$. Prenons la fonction $V(\Psi, t)$ dépendante du temps :

$$V(\Psi, t) = \langle \Psi - \Psi_r, \Psi - \Psi_r \rangle. \quad (2.2)$$

V est positive pour tout $t > 0$ et tout $\Psi \in \mathbb{S}^{2n-1}$ et s'annule lorsque $\Psi = \Psi_r$. Un calcul très simple montre que V est une fonction de Lyapounov de contrôle :

$$\frac{dV}{dt} = 2(u - u_r)\Im(\langle H_1\Psi(t), \Psi_r \rangle) + 2(\omega - \omega_r)\Im(\langle \Psi(t), \Psi_r \rangle)$$

où \Im est la partie imaginaire. En prenant, par exemple,

$$\begin{aligned} u &= u_r(t) - a\Im(\langle H_1\Psi(t), \Psi_r(t) \rangle) \\ \omega &= \omega_r(t) - b\Im(\langle \Psi(t), \Psi_r(t) \rangle) \end{aligned} \quad (2.3)$$

($a > 0$ et $b > 0$), nous assurons $dV/dt \leq 0$. Nous allons détailler le cas important où la trajectoire de référence correspond à un état d'équilibre : $u_r = 0, \omega_r = -\lambda$ et $\Psi_r = \phi$, où ϕ est un vecteur propre de H_0 associé à la valeur propre $\lambda \in \mathbb{R}$ ($H_0\phi = \lambda\phi, \|\phi\| = 1$). Les contrôles (2.3) deviennent alors

$$u = -a\Im(\langle H_1\Psi, \phi \rangle), \quad \omega = -\lambda - b\Im(\langle \Psi, \phi \rangle). \quad (2.4)$$

2.1.3 Exemples et simulations

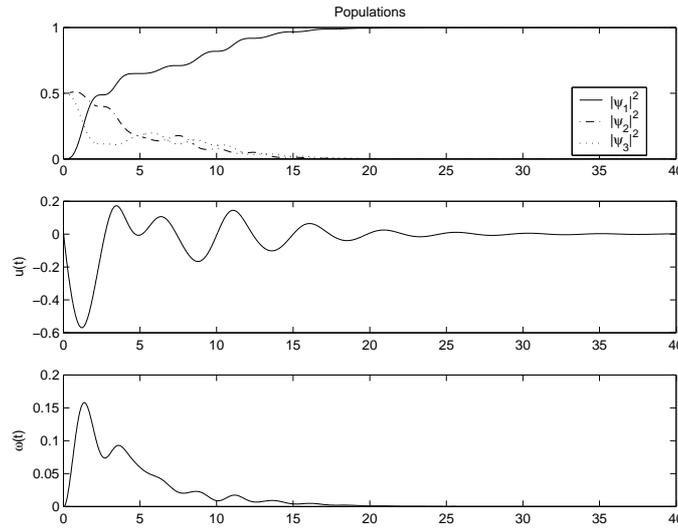


FIG. 2.1 – les populations ($|\Psi_1|^2, |\Psi_2|^2, |\Psi_3|^2$) et les contrôles (u, ω); condition initiale $(0, 1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$; système défini par (2.5) avec le feedback (2.6).

Considérons $n = 3$, $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3)^T$ et

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}, \quad H_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Nous allons donc utiliser le contrôle Lyapounov précédent pour piéger notre système dans le premier état propre $\phi = (1, 0, 0)$ d'énergie $\lambda = 0$. Nous prenons (2.4) avec $a = b = 1/2$

(* est le complexe conjugué)

$$u = -\frac{1}{2}\Im(\Psi_2^* + \Psi_3^*), \quad \omega = -\frac{1}{2}\Im(\Psi_1^*). \quad (2.6)$$

Les simulations de la Figure 2.1 représentent la trajectoire d'état initial $\Psi_0 = (0, 1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})^T$. Des simulations avec d'autres états initiaux montrent que les trajectoires convergent toujours vers ϕ . Donc il est pertinent d'appliquer cette technique de Lyapounov sur le système (2.5). Le Théorème 1 a pour objet de montrer que la propriété de convergence presque globale est équivalente à la contrôlabilité du système linéarisé autour de ϕ . Considér-

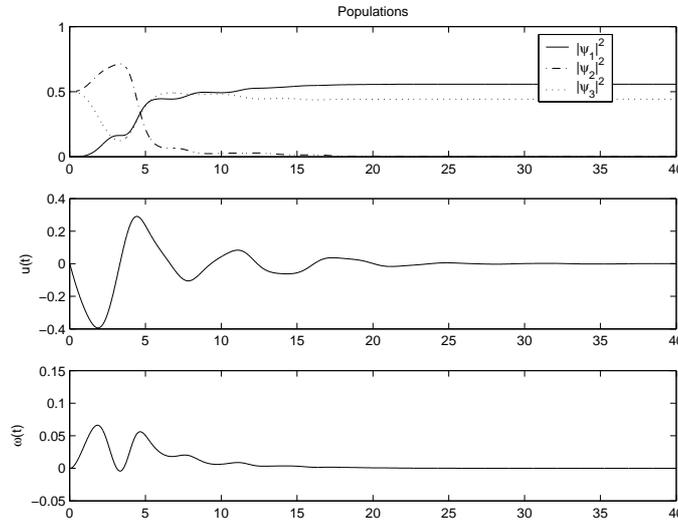


FIG. 2.2 – les populations ($|\Psi_1|^2, |\Psi_2|^2, |\Psi_3|^2$) et les contrôles (u, ω); condition initiale $(0, 1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$; H_0 défini par (2.5), H_1 par (2.7) et le feedback donné par (2.8).

ons maintenant un autre exemple qui met en évidence les limites d'une telle méthode. H_0 et l'état cible ϕ restent les mêmes mais H_1 devient :

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Nous avons les feedbacks suivants

$$u = -\frac{1}{2}\Im(\Psi_2^*), \quad \omega = -\frac{1}{2}\Im(\Psi_1^*). \quad (2.8)$$

Les simulations de la Figure 2.2 ont pour état initial $(0, 1/\sqrt{2}, \sqrt{2})$. Nous voyons clairement qu'un tel feedback diminue la distance par rapport à l'état cible ϕ mais n'assure pas la

convergence. Notons que le système est quand même contrôlable : l'algèbre de Lie engendrée par H_0/i et H_1/i coïncide avec $u(3)$ [109]. En fait, comme le montre le Théorème 1, la non-contrôlabilité du système linéarisé autour de ϕ est à l'origine de ce manque de convergence.

Pour remédier à cette situation, nous allons utiliser (2.3) avec une trajectoire de référence adiabatique (quasi-statique : $u_r(t)$ lentement variable)

$$i \frac{d}{dt} \Psi_r = (H_0 + u_r(t)H_1) \Psi_r, \quad \Psi_r(0) = (1, 0, 0). \quad (2.9)$$

Ici, $u_r = \frac{1}{2} \sin(2\pi t/T)$ avec une période $T = 300$, grande par rapport à la période naturelle de H_0 . Cela assure une variation lente pour u_r par rapport au temps. Considérons les termes de feedback suivants

$$u = u_r - \frac{\Im(\langle H_1 \Psi, \Psi_r(t) \rangle)}{2}, \quad \omega = -\frac{\Im(\langle \Psi, \Psi_r(t) \rangle)}{2}. \quad (2.10)$$

Comme u_r varie lentement, la théorie adiabatique assure que Ψ_r suit étroitement le premier état propre de $H_0 + u_r H_1$ [87]. Quand u_r retourne à 0, Ψ_r retourne quasiment sur le premier espace propre engendré par $(1, 0, 0)$: nous avons $\Psi_r(T) \approx (\exp(i\theta), 0, 0)$ avec un terme de phase θ . Si au cours de cette évolution lente, la trajectoire de référence Ψ_r passe par un voisinage de l'état propre de $H_0 + u_r H_1$ où le système linéarisé est contrôlable, cela améliore fortement la convergence. La Figure 2.3 montre l'efficacité de ce recours. Dans la Section 2.4, nous présenterons une approche différente fondée sur une fonction de Lyapounov définie implicitement. Cette approche est une méthode qui assure la convergence locale lorsque le système linéarisé n'est pas contrôlable.

2.1.4 Analyse de convergence

Le but de cette sous-section est de montrer le résultat suivant dont les Figures 2.1 et 2.2 sont les illustrations.

Théorème 1. *Considérons (2.1) avec $\Psi \in \mathbb{S}^{2n-1}$ et un état propre $\phi \in \mathbb{S}^{2n-1}$ de H_0 associé à la valeur propre λ . Prenons, de plus, le feedback statique (2.4) avec $a, b > 0$. Alors, nous avons les deux propositions suivantes :*

1. *Supposons que le spectre de H_0 est non-dégénéré par rapport à λ :*

$$|\lambda_i - \lambda| \neq |\lambda_j - \lambda|, \quad \forall i \neq j \quad \lambda_i \text{ et } \lambda_j \text{ valeurs propres de } H_0,$$

alors l'ensemble Ω -limite du système en boucle fermée est donné par l'intersection de \mathbb{S}^{2n-1} avec l'espace vectoriel $E = \mathbb{R}\phi \cup_{\alpha} \mathbb{C}\Phi_{\alpha}$. Ici Φ_{α} parcourt les vecteurs propres de H_0 non co-linéaires avec ϕ et tels que $\langle \Phi_{\alpha} | H_1 | \phi \rangle = 0$.

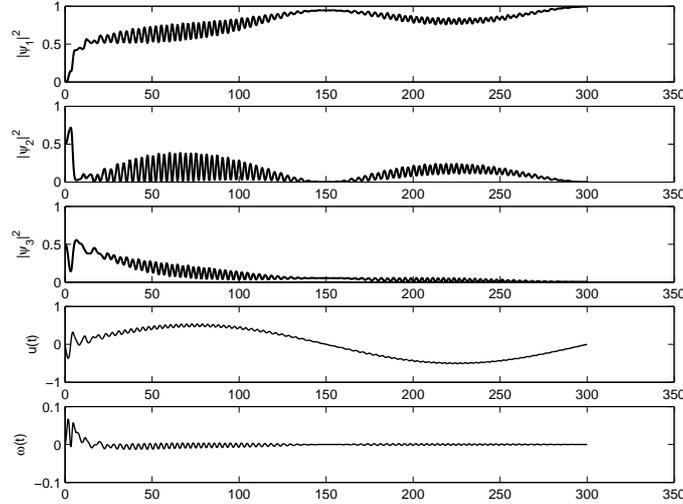


FIG. 2.3 – suivi de trajectoire adiabatique (2.9) via le feedback (2.10); le système et la condition initiale identiques à la Figure 2.2.

2. L'ensemble Ω -limite est réduit à $\{\phi, -\phi\}$ si et seulement si H_0 est non-dégénéré par rapport à λ et $E = \mathbb{R}\phi$. Dans ce cas : l'état d'équilibre ϕ est exponentiellement stable (sur \mathbb{S}^{2n-1}); l'état d'équilibre $-\phi$ est instable; l'ensemble attracteur de ϕ est exactement $\mathbb{S}^{2n-1} \setminus \{-\phi\}$. Cela correspond à la contrôlabilité du système linéarisé autour de ϕ . Ce système est linéaire, indépendant du temps et évolue sur le plan tangent à \mathbb{S}^{2n-1} au point ϕ .

Remarque 1. Ici la notation $\langle \phi_1 | H | \phi_2 \rangle$, couramment utilisée par les physiciens, correspond au produit Hermitien $\langle H\phi_1, \phi_2 \rangle$.

Pour l'exemple de la Figure 2.1, il est clair que $E = \mathbb{R}\phi$: H_0 est non-dégénéré et $\phi = (1, 0, 0)$ est presque globalement asymptotiquement stable. La condition $E = \mathbb{R}\phi$, physiquement, indique que l'état cible ϕ est connecté à tous les autres états propres via des transitions mono-photoniques (transitions en absorbant ou émettant un seul photon : voir, par exemple, [87]).

Pour l'exemple de la Figure 2.2, les éléments de E sont de la forme $(x, 0, z)$ avec $x \in \mathbb{R}$ et $z \in \mathbb{C}$; nous observons en effet que l'ensemble Ω -limite contient des éléments de la forme $(x, 0, r \exp(i\theta))$ avec x, r et θ dans \mathbb{R} tels que $x^2 + r^2 = 1$. Physiquement, la transition entre ϕ et l'état d'énergie 3/2 nécessite au moins deux photons : le feedback (2.8) ne peut pas trouver un tel processus multi-photonique (transitions en absorbant ou émettant plusieurs photons).

La preuve du Théorème 1 est fondée sur la caractérisation de l'ensemble Ω -limite via le principe d'invariance de LaSalle. Nous proposons ici une description complète de cet

ensemble invariant à l'aide du système linéaire (2.11). Une telle description devient très simple lorsque l'hypothèse de non-dégénérescence de H_0 par rapport à λ est vérifiée.

Démonstration de la proposition (1) du Théorème 1 :

À un déplacement près sur ω et H_0 , on peut supposer que $\lambda = 0$. Le principe d'invariance de LaSalle (voir, par exemple, Théorème 3.4, page 115 de [65]) indique que les trajectoires du système en boucle fermée convergent vers le plus grand ensemble invariant contenu dans $dV/dt = 0$ où V est définie par (2.2). La relation $dV/dt = 0$ implique que $\Im(\langle H_1 \Psi, \phi \rangle) = \Im(\langle \Psi, \phi \rangle) = 0$. Donc $u = 0$ et $\omega = 0$. L'invariance revient à $i \frac{d}{dt} \Psi = H_0 \Psi$, $\frac{d}{dt} \Im(\langle H_1 \Psi, \phi \rangle) = 0$ et $\frac{d}{dt} \Im(\langle \Psi, \phi \rangle) = 0$. Clairement $\frac{d}{dt} \Im(\langle \Psi, \phi \rangle) = 0$ ne donne pas d'information supplémentaire car $H_0 \phi = 0$. Seul $\frac{d}{dt} \Im(\langle H_1 \Psi, \phi \rangle) = 0$ aboutit à une nouvelle équation indépendante : $\Re(\langle H_1 H_0 \Psi, \phi \rangle) = 0$. Celle-ci peut s'écrire sous la forme $\Re(\langle [H_0, H_1] \Psi, \phi \rangle) = 0$. De la même façon $\frac{d}{dt} \Re(\langle [H_0, H_1] \Psi, \phi \rangle) = 0$ implique que $\Im(\langle [H_0, [H_0, H_1]] \Psi, \phi \rangle) = 0$ et ainsi de suite. Le plus grand ensemble invariant est alors caractérisé par $\Im(\langle \Psi, \phi \rangle) = 0$ et les relations suivantes :

$$\Im(\langle H_1 \Psi, \phi \rangle) = 0, \quad \Re(\langle [H_0, H_1] \Psi, \phi \rangle) = 0, \quad \Im(\langle [H_0, [H_0, H_1]] \Psi, \phi \rangle) = 0, \quad \dots$$

ce qui correspond à la "ad-condition" obtenue dans [62]. À chaque étape, nous avons le crochet de Lie de l'Hamiltonien H_0 avec l'Hamiltonien de l'étape précédente.

On peut toujours supposer que H_0 est diagonale. Donc, le calcul des commutateurs $[H_0, B]$, où $B = (B_{ij})$ est une matrice $n \times n$, devient extrêmement simple. Avec $H_0 = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, nous avons $[H_0, B]_{i,j} = (\lambda_i - \lambda_j) B_{ij}$. Prenons $B = H_1$ pour simplifier les notations. Alors :

$$\begin{aligned} [H_0, B] &= ((\lambda_i - \lambda_j) B_{ij}) \\ [H_0, [H_0, B]] &= ((\lambda_i - \lambda_j)^2 B_{ij}) \\ &\vdots \\ \underbrace{[H_0, [H_0, \dots, [H_0, B]] \dots]}_{k \text{ fois}} &= ((\lambda_i - \lambda_j)^k B_{ij}). \end{aligned}$$

Donc le système précédent s'écrit :

$$\begin{aligned} \Im(\sum_j B_{1j} \Psi_j) &= 0, \\ \Re(\sum_j (\lambda_1 - \lambda_j) B_{1j} \Psi_j) &= 0, \\ &\vdots \\ \Im(\sum_j (\lambda_1 - \lambda_j)^{2k} B_{1j} \Psi_j) &= 0, \\ \Re(\sum_j (\lambda_1 - \lambda_j)^{2k+1} B_{1j} \Psi_j) &= 0, \\ &\dots \end{aligned} \tag{2.11}$$

En utilisant la structure de Vandermonde et le fait que le spectre de H_0 est non-dégénéré par rapport à λ , $\Psi \in \mathbb{S}^{2n-1}$ est dans l'ensemble Ω -limite si et seulement si $B_{1j}\Psi_j = 0$, $\forall j \in \{2, \dots, n\}$ et $\Im(\Psi_1) = 0$.

Démonstration de la proposition (2) du Théorème 1 :

Dans tous les cas, l'ensemble Ω -limite contient ϕ et $-\phi$. Si le spectre de H_0 est non-dégénéré par rapport à λ et $E = \mathbb{R}\phi$, la proposition (1) implique que l'ensemble Ω -limite est tout simplement $\{\pm\phi\}$. Maintenant, supposons qu'au moins une de ces deux hypothèses n'est pas vérifiée.

Supposons que $E \neq \mathbb{R}\phi$. Il existe donc un vecteur propre Φ de H_0 non co-linéaire avec ϕ tel que $\langle H_1\Phi, \phi \rangle = 0$. Avec $\Psi(0) = \Phi$ comme état initial, nous avons $u(t) = 0$, $\omega(t) = -\lambda$ et $\Psi(t) = \Phi$ pour tout $t > 0$. L'ensemble Ω -limite contient Φ .

Supposons que $E = \mathbb{R}\phi$, mais que H_0 a un spectre dégénéré par rapport à λ . Nous considérons trois cas :

1. Il y a un vecteur propre ϕ_k de longueur 1 de H_0 orthogonal à ϕ mais avec la même valeur propre λ . Comme $E = \mathbb{R}\phi$, $B_{1k} = \langle H_1\phi_k, \phi \rangle \neq 0$. En prenant $\Psi_0 = \frac{B_{1k}}{|B_{1k}|}\phi_k$ comme état initial, nous avons $u(t) = 0$, $\omega = -\lambda$ et $\Psi(t) = \frac{B_{1k}}{|B_{1k}|}\phi_k$ appartient à l'ensemble Ω -limite.
2. Il existe deux vecteurs propres orthogonaux ϕ_k et ϕ_l de H_0 , de longueur 1 et associés aux mêmes valeurs propres $\mu \neq \lambda$. Comme $E = \mathbb{R}\phi$, $B_{1k} = \langle H_1\phi_k, \phi \rangle \neq 0$ et $B_{1l} = \langle H_1\phi_l, \phi \rangle \neq 0$. En prenant $\Psi(0) = (B_{1k}\phi_l - B_{1l}\phi_k)/\sqrt{|B_{1k}|^2 + |B_{1l}|^2}$, nous obtenons $u(t) = 0$, $\omega = -\lambda$ et

$$\Psi(t) = e^{-i(\mu-\lambda)t}\Psi(0).$$

Donc l'ensemble Ω -limite contient $(e^{i\alpha}\Psi(0))_{\alpha \in [0, 2\pi]}$.

3. Il existe deux vecteurs propres orthogonaux ϕ_k et ϕ_l de H_0 , de longueur 1 et associés aux valeurs propres λ_k et λ_l telles que

$$\lambda = \frac{\lambda_k + \lambda_l}{2}.$$

Comme $E = \mathbb{R}\phi$, $B_{1k} = \langle H_1\phi_k, \phi \rangle \neq 0$ et $B_{1l} = \langle H_1\phi_l, \phi \rangle \neq 0$. En prenant $\Psi(0) = (B_{1k}^*\phi_l + B_{1l}^*\phi_k)/\sqrt{|B_{1k}|^2 + |B_{1l}|^2}$, nous avons $u(t) = 0$, $\omega = -\lambda$ et

$$\Psi(t) = e^{-i\frac{(\lambda_l - \lambda_k)}{2}t} B_{1k}^*\phi_l + e^{-i\frac{(\lambda_k - \lambda_l)}{2}t} B_{1l}^*\phi_k.$$

Donc l'ensemble Ω -limite contient $(e^{i\alpha}B_{1k}^*\phi_l - e^{-i\alpha}B_{1l}^*\phi_k)_{\alpha \in [0, 2\pi]}$.

Ainsi, la preuve de la première partie de la proposition (2) est finie.

Essayons maintenant de montrer que ϕ est localement exponentiellement stable lorsque H_0 satisfait l'hypothèse de non-dégénérescence par rapport à λ et que $E = \mathbb{R}\phi$. Nous montrons que le système linéarisé en boucle fermée est asymptotiquement stable. Cela

implique directement que l'état d'équilibre ϕ est localement exponentiellement stable. Prenons $\Psi(t) = \phi + \Delta\Psi(t)$ avec $\Delta\Psi$ petit. En considérant les termes dont l'ordre est inférieur ou égal à deux, nous avons

$$i \frac{d}{dt} \Delta\Psi = (H_0 - \lambda I) \Delta\Psi - a \Im(\langle H_1 \Delta\Psi, \phi \rangle) H_1 \phi - b \Im(\langle \Delta\Psi, \phi \rangle) \phi$$

et $\Re(\langle \Delta\Psi, \phi \rangle) = 0$ (définition de l'espace tangent au point ϕ à la sphère \mathbb{S}^{2n-1}). Prenons $W(\Delta\Psi) = \frac{1}{2} \langle \Delta\Psi, \Delta\Psi \rangle$. Un calcul simple montre que $dW/dt \leq 0$. Ainsi $E = \mathbb{R}\phi$ implique que l'ensemble invariant de LaSalle pour le système linéarisé est réduit à $\Delta\Psi = 0$ sur l'espace tangent au point ϕ à \mathbb{S}^{2n-1} .

Le résultat $-\phi$ instable provient du fait que la fonction V sur la sphère \mathbb{S}^{2n-1} prend son maximum seulement en $\Psi = -\phi$. Donc si $\Psi_0 \neq -\phi$, $\Psi(t)$ doit forcément converger vers l'autre point de l'ensemble Ω -limite qui est ϕ . Alors $\lim_{t \rightarrow +\infty} \Psi(t) = \phi$; l'équilibre $-\phi$ est instable, la région attractive de ϕ est bien $\mathbb{S}^{2n-1} \setminus \{-\phi\}$.

Finalement, nous allons montrer que H_0 non-dégénéré par rapport à λ et $E = \mathbb{R}\phi$ est équivalent à la contrôlabilité du système linéarisé autour de ϕ .

Prenons $\Psi(t) = \phi + \Delta\Psi(t)$ avec $\Re(\langle \Delta\Psi, \phi \rangle) = 0$, $u = \Delta u$ et $\omega = -\lambda + \Delta\omega$ avec $\Delta\Psi$, Δu et $\Delta\omega$ petits. Alors, en considérant les termes dont l'ordre est inférieur ou égal à deux, (2.1) s'écrit

$$i \frac{d}{dt} \Delta\Psi = (H_0 - \lambda I) \Delta\Psi + \Delta u H_1 \phi + \Delta\omega \phi.$$

Prenons (ϕ_1, \dots, ϕ_n) une base propre orthonormée de H_0 associée à $(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ avec $\phi_1 = \phi$ et $\lambda_1 = \lambda$. Supposons de plus que $(z_1, \dots, z_n) \in \mathbb{C}^n$ représente les coordonnées de $\Delta\Psi$ dans cette base. Donc : $\Re(z_1) = 0$ et

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\Im(z_1)) &= -\Delta\omega - B_{11} \Delta u \\ i \frac{d}{dt} z_2 &= (\lambda_2 - \lambda_1) z_2 + B_{12} \Delta u \\ &\vdots \\ i \frac{d}{dt} z_n &= (\lambda_n - \lambda_1) z_n + B_{1n} \Delta u \end{aligned}$$

où $B_{ij} = \langle \phi_i | H_1 | \phi_j \rangle$. La contrôlabilité est alors équivalente au fait que $B_{1i} \neq 0$ et $|\lambda_i - \lambda_1| \neq |\lambda_j - \lambda_1|$ pour $i \neq j$ (utiliser, par exemple, le critère de Kalman). Cela est clairement équivalent à H_0 non-dégénéré par rapport à λ et $E = \mathbb{R}\phi$.

Le lemme suivant sera utile pour la preuve du Théorème 2.

Lemme 1. *Considérons (2.1). Prenons $\phi \in \mathbb{S}^{2n-1}$ un vecteur propre de H_0 associé à la valeur propre λ . Supposons H_0 non-dégénéré par rapport à λ et que l'espace vectoriel défini*

au Théorème 1 coïncide avec $\mathbb{R}\phi$. Prenons $\theta \in \mathbb{R}$ et considérons le système boucle fermée suivant ($a, b > 0$)

$$(\Upsilon) \begin{cases} i \frac{d}{dt} \Psi &= (H_0 + uH_1 + \omega)\Psi \\ u &= -a\Im(\langle H_1 \Psi, e^{i(\theta-\lambda t)} \phi \rangle) \\ \omega &= -b\Im(\langle \Psi, e^{i(\theta-\lambda t)} \phi \rangle) \end{cases}$$

Alors pour tout $\eta > 0$ et $\epsilon > 0$, il existe $T > 0$, tel que pour tout $\theta \in \mathbb{R}$ et $\Psi^0 \in \mathbb{C}^n$ satisfaisant $\|\Psi^0 - \exp(i\theta)\phi\| \leq 2 - \eta$, nous avons $\forall t \geq T$, $\min_{\alpha \in [0, 2\pi]} \|\Psi(t) - \exp(i\alpha)\phi\| \leq \epsilon$ où Ψ est la solution de (Υ) avec $\Psi(0) = \Psi^0$.

Remarquons que T est indépendant de θ : ce point sera crucial pour la preuve du Théorème 2. La preuve détaillée de ce lemme est laissée aux lecteurs. Elle est fondée sur les arguments suivants :

- À un déplacement près de $-\lambda$ sur ω et H_0 , et en multipliant Ψ par $e^{-i\theta}$, on peut supposer que $\lambda = 0$ et $\theta = 0$. Le feedback (2.4) réapparaît.
- $\|\Psi - \phi\|^2$ est une fonction de Lyapounov qui prend sa valeur maximum, 2, seulement en $\Psi = -\phi$.
- Ψ évolue sur l'ensemble compact \mathbb{S}^{2n-1} . Grâce à la proposition (2) du Théorème 1, nous savons que l'ensemble Ω -limite de (Υ) se réduit à deux points d'équilibres $\{-\phi, \phi\}$. ϕ est exponentiellement stable et sa région attractive est $\mathbb{S}^{2n-1} \setminus \{-\phi\}$.
- Le temps parcouru par $\Psi(t)$ avant d'entrer dans la sphère de centre ϕ et de rayon ϵ est une fonction continue de $\Psi(0) \in \mathbb{S}^{2n-1} \setminus \{-\phi\}$. Cette fonction admet un maximum sur tout sous-ensemble compact de $\mathbb{S}^{2n-1} \setminus \{-\phi\}$.

2.1.5 Suivi de trajectoires pour les références adiabatiques

Le but de cette sous-section est de montrer le théorème suivant, dont les simulations de la Figure 2.3 sont des illustrations.

Théorème 2. *Considérons (2.1) et l'application analytique $u \mapsto (\phi^u, \lambda^u)$ où ϕ^u est un vecteur propre de $H_0 + uH_1$ de longueur 1 associé à la valeur propre λ^u . Prenons aussi une fonction régulière $f : [0, 1] \mapsto [0, 1]$ telle que $f(0) = f(1) = 0$. Pour $T > 0$, notons par $[0, T] \ni t \mapsto \Psi_r(t)$ la trajectoire de référence, solution de*

$$(\Sigma_r) \begin{cases} i \frac{d}{dt} \Psi_r &= (H_0 + u_r(t)H_1)\Psi_r \\ \Psi_r(0) &= \phi^0 \\ u_r(t) &= f(t/T). \end{cases}$$

et par $[0, T] \ni t \mapsto \Psi(t)$ la trajectoire du système en boucle fermée (voir (2.3), $a, b > 0$ constants)

$$(\Sigma) \begin{cases} i \frac{d}{dt} \Psi &= (H_0 + u(t)H_1 + \omega)\Psi \\ \Psi(0) &= \Psi^0 \\ u &= u_r(t) - a\Im(\langle H_1 \Psi, \Psi_r \rangle) \\ \omega &= -b\Im(\langle \Psi, \Psi_r \rangle). \end{cases}$$

Supposons qu'il existe $\bar{s} \in]0, 1[$ tel que le système linéarisé de (2.1) autour de l'état stationnaire $\bar{\Psi} = \phi^{\bar{u}}$, $\bar{u} = f(\bar{s}) = u_r(\bar{s}T)$ et $\bar{\omega} = -\lambda^{\bar{u}}$ est contrôlable.

Alors pour tout $\eta > 0$ et $\epsilon > 0$ il existe $\bar{T} > 0$, tel que pour tout $\Psi^0 \in \mathbb{S}^{2n-1}$ avec $\|\Psi^0 - \phi^0\| \leq 2 - \eta$, nous avons

$$\forall T \geq \bar{T}, \quad \min_{\alpha \in [0, 2\pi]} \|\Psi(T) - e^{i\alpha} \phi^0\| \leq \epsilon.$$

L'existence de l'application analytique $u \mapsto (\phi^u, \lambda^u)$ est assurée par le résultat classique de la théorie de perturbation pour les opérateurs auto-adjoints de dimension finie ([64] page 121), que nous exposons ici :

Lemme 2. *Considérons les matrices $n \times n$, H_0 et H_1 Hermitiennes à coefficients dans \mathbb{C} et définissons*

$$H(u) := H_0 + uH_1.$$

Pour tout $u \in \mathbb{R}$, il existe une base orthonormée $(\phi_j^u)_{j \in \{1, \dots, n\}}$ de \mathbb{C}^n constituée des vecteurs propres de $H(u)$. Ces vecteurs propres orthonormés peuvent être choisis comme des fonctions analytiques de $u \in \mathbb{R}$.

Pour le cas de la Figure 2.3, il est alors clair que le vecteur propre $\phi^0 = (1, 0, 0)$ de H_0 appartient à une telle branche. De plus, des calculs numériques simples indiquent que pour $\bar{u} = 0.1$, le système linéarisé autour de $\phi^{\bar{u}}$ est contrôlable. Comme ϕ^0 est défini à une multiplication par $e^{i\theta}$ près, $\theta \in [0, 2\pi]$, on peut toujours choisir ϕ^0 tel que $\|\Psi^0 - \phi^0\| \leq 1$. Donc, toutes les conditions du Théorème 2 sont vérifiées et nous pouvons ajuster l'erreur finale en choisissant T suffisamment grand. On observe que le temps T requis pour atteindre une erreur finale inférieure à ϵ croît en $-k \log \epsilon$ (k constant), lorsque $\epsilon > 0$ tend vers 0. Un tel comportement peut être interprété comme une sorte de convergence exponentielle (voir, par exemple, [85]).

La preuve du Théorème 2 est fondée sur le théorème adiabatique suivant (voir [59] pour une présentation détaillée de différentes versions du théorème adiabatique).

Théorème 3. *Considérons la solution $[0, T] \ni t \mapsto \Psi_r(t)$ de (Σ_r) . Alors pour tout $\epsilon > 0$, il existe $T_\epsilon > 0$ tel que pour tout $T \geq T_\epsilon$,*

$$\forall t \in [0, T], \quad \min_{\alpha \in [0, 2\pi]} \|\Psi_r(t) - e^{i\alpha} \phi^{u_r(t)}\| \leq \epsilon.$$

La suite de cette sous-section est consacrée à la démonstration du Théorème 2.

Démonstration du Théorème 2 :

Prenons $\eta > 0$, $\eta > 0$ et $T > 0$. Notons par $\mathbb{R} \ni t \mapsto \tilde{\Psi}(t)$ la solution du système en boucle fermée suivant

$$(\tilde{\Sigma}) \quad \begin{cases} i \frac{d}{dt} \tilde{\Psi} &= (H_0 + \tilde{u}H_1 + \tilde{\omega}) \tilde{\Psi} \\ \tilde{\Psi}(\bar{s}T) &= \Psi(\bar{s}T) \\ \tilde{u} &= \bar{u} - a \Im(\langle H_1 \tilde{\Psi}, e^{i(\bar{\theta} - (t - \bar{s}T)\lambda^{\bar{u}})} \phi^{\bar{u}} \rangle) \\ \tilde{\omega} &= -b \Im(\langle \tilde{\Psi}, e^{i(\bar{\theta} - (t - \bar{s}T)\lambda^{\bar{u}})} \phi^{\bar{u}} \rangle) \end{cases}$$

où l'angle $\bar{\theta} \in [0, 2\pi]$ est tel que

$$\|\Psi_r(\bar{s}T) - e^{i\bar{\theta}}\phi^{\bar{u}}\| = \min_{\alpha \in [0, 2\pi]} \|\Psi_r(\bar{s}T) - e^{i\alpha}\phi^{\bar{u}}\|.$$

Le Théorème adiabatique 3 implique l'existence de $T_a > 0$ tel que pour tout $T > T_a$:

$$\forall t \in [0, T], \quad \min_{\alpha \in [0, 2\pi]} \|\Psi_r(t) - e^{i\alpha}\phi^{u_r(t)}\| \leq \frac{\eta}{2}. \quad (2.12)$$

Comme $\|\Psi - \Psi_r\|$ est une fonction décroissante du temps, nous avons

$$\|\Psi(\bar{s}T) - \Psi_r(\bar{s}T)\| \leq \|\Psi(0) - \Psi_r(0)\| \leq 2 - \eta.$$

Mais pour $T \geq T_a$, $\|\Psi_r(\bar{s}T) - e^{i\bar{\theta}}\phi^{\bar{u}}\| \leq \eta/2$. Donc pour $T \geq T_a$,

$$\|\Psi(\bar{s}T) - e^{i\bar{\theta}}\phi^{\bar{u}}\| \leq \|\Psi(\bar{s}T) - \Psi_r(\bar{s}T)\| + \|\Psi_r(\bar{s}T) - e^{i\bar{\theta}}\phi^{\bar{u}}\| \leq 2 - \eta/2.$$

Le Lemme 1 appliqué à $(\tilde{\Sigma})$, assure l'existence d'un $T_b > 0$ tel que

$$\forall t \geq T_b, \quad \min_{\alpha \in [0, 2\pi]} \|\tilde{\Psi}(\bar{s}T + t) - e^{i\alpha}\phi^{\bar{u}}\| \leq \frac{\epsilon}{3}. \quad (2.13)$$

On peut toujours choisir T_a suffisamment grand, tel que pour tout $T \geq T_a$, $\bar{s}T + T_b \leq T$, $\bar{s} < 1$ et T_b est indépendant de $T > T_a$. Ce dernier point est crucial pour la suite : il résulte de l'invariance par rapport à une translation temporelle du Lemme 1 et également de l'indépendance de T_b par rapport à $\bar{\theta}$ qui dépend a priori de T .

Comparons maintenant les solutions de (Σ) et $(\tilde{\Sigma})$ pour $t \in [\bar{s}T, \bar{s}T + T_b]$. Les deux systèmes prennent les mêmes valeurs initiales à l'instant $t = \bar{s}T$. Les deux sont en boucle fermée (la dynamique (2.1) avec le feedback (2.3)). Seules les trajectoires de référence sont différentes : $t \mapsto \Psi_r(t)$ pour (Σ) et $t \mapsto e^{i(\bar{\theta} - (t - \bar{s}T)\lambda^{\bar{u}})}\phi^{\bar{u}}$ pour $(\tilde{\Sigma})$. Montrons maintenant que

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \left(\sup_{t \in [\bar{s}T, \bar{s}T + T_b]} \|\Psi_r(t) - e^{i(\bar{\theta} - (t - \bar{s}T)\lambda^{\bar{u}})}\phi^{\bar{u}}\| \right) = 0. \quad (2.14)$$

Pour T grand et sur l'intervalle $[\bar{s}T, \bar{s}T + T_b]$, ces deux trajectoires de référence satisfont presque les mêmes équations différentielles (2.1) avec presque les mêmes conditions initiales à l'instant $t = \bar{s}T$: $\max_{t \in [\bar{s}T, \bar{s}T + T_b]} |u_r(t) - \bar{u}|$ et $\|\Psi_r(\bar{s}T) - e^{i\bar{\theta}}\phi^{\bar{u}}\|$ tendent vers 0 lorsque T tend vers $+\infty$. Comme la longueur de l'intervalle T_b ne dépend pas de T , en utilisant des arguments standards de continuité, nous avons la relation (2.14). Pour la même raison, (2.14) implique pour (Σ) et $(\tilde{\Sigma})$:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \left(\sup_{t \in [\bar{s}T, \bar{s}T + T_b]} \|\Psi(t) - \tilde{\Psi}(t)\| \right) = 0. \quad (2.15)$$

Il existe donc un $\bar{T} > T_a$ tel que pour tout $T \geq \bar{T}$, nous avons via (2.14) et (2.15) :

$$\|\Psi(\bar{s}T + T_b) - \tilde{\Psi}(\bar{s}T + T_b)\| \leq \frac{\epsilon}{3} \quad \text{et} \quad \|\Psi_r(\bar{s}T + T_b) - e^{i(\bar{\theta} - T_b \lambda^{\bar{u}})} \phi^{\bar{u}}\| \leq \frac{\epsilon}{3}.$$

Comme

$$\begin{aligned} & \|\Psi(\bar{s}T + T_b) - \Psi_r(\bar{s}T + T_b)\| \leq \\ & \|\Psi(\bar{s}T + T_b) - \tilde{\Psi}(\bar{s}T + T_b)\| + \|\tilde{\Psi}(\bar{s}T + T_b) - e^{i(\bar{\theta} - T_b \lambda^{\bar{u}})} \phi^{\bar{u}}\| + \|e^{i(\bar{\theta} - T_b \lambda^{\bar{u}})} \phi^{\bar{u}} - \Psi_r(\bar{s}T + T_b)\| \end{aligned}$$

nous avons, pour $T \geq \bar{T}$: $\|\Psi(\bar{s}T + T_b) - \Psi_r(\bar{s}T + T_b)\| \leq \epsilon$. Finalement $\|\Psi - \Psi_r\|$ est une fonction décroissante du temps et cela conclut la démonstration du théorème : pour $T \geq \bar{T}$,

$$\|\Psi(T) - \Psi_r(T)\| \leq \|\Psi(\bar{s}T + T_b) - \Psi_r(\bar{s}T + T_b)\| \leq \epsilon$$

car $\bar{s}T + T_b \leq T$.

Il convient de se demander quand l'hypothèse clé du Théorème 2 est vérifiée. Supposons que (2.1) est contrôlable. Peut-on toujours trouver un $\bar{u} \in \mathbb{R}$ tel que le système linéarisé autour de $H_0 + \bar{u}H_1$ est contrôlable ? Tous les exemples que nous avons testés, justifient cette conjecture. Est-elle vraie pour toute équation de Schrödinger contrôlable de dimension finie ?

2.2 Suivi de trajectoires

Dans cette courte section, nous proposons une généralisation de la Proposition (2) du Théorème (1), au cas d'une trajectoire de référence analytique arbitraire. On commence par écrire la dynamique complexe, comme une dynamique réelle dans \mathbb{R}^{2n} .

Prenons

$$\tilde{\Psi} = (\Re(\Psi), \Im(\Psi))^T, \quad \tilde{\Psi}_r = (\Re(\Psi_r), \Im(\Psi_r))^T,$$

$$G_0 = \begin{pmatrix} \Im(H_0) & \Re(H_0) \\ -\Re(H_0) & \Im(H_0) \end{pmatrix}, \quad G_1 = \begin{pmatrix} \Im(H_1) & \Re(H_1) \\ -\Re(H_1) & \Im(H_1) \end{pmatrix}, \quad G_2 = \begin{pmatrix} 0 & Id \\ -Id & 0 \end{pmatrix}.$$

Les matrices réelles G_0 , G_1 et G_2 sont anti-symétriques. La dynamique en boucle fermée (2.1) avec (2.3), s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\Psi} &= (G_0 + uG_1 + \omega G_2) \tilde{\Psi} \\ u &= u_r - a \left(G_1 \tilde{\Psi}, \tilde{\Psi}_r \right)_{\mathbb{R}^{2n}} \\ \omega &= \omega_r - b \left(G_2 \tilde{\Psi}, \tilde{\Psi}_r \right)_{\mathbb{R}^{2n}}. \end{aligned} \tag{2.16}$$

Ici $(\cdot, \cdot)_{\mathbb{R}^{2n}}$ désigne le produit scalaire dans \mathbb{R}^{2n} . Prenons

$$\begin{aligned} A(t) &= G_0 + u_r(t)G_1 + \omega_r(t)G_2 \\ b_1(t) &= G_1 \tilde{\Psi}_r(t) \\ b_2(t) &= G_2 \tilde{\Psi}_r(t) \\ B(t) &= (b_1(t), b_2(t)). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Alors le système linéarisé autour de la trajectoire de référence $(\tilde{\Psi}_r, u_r, \omega_r)$ s'écrit :

$$\frac{d}{dt} \delta \tilde{\Psi} = A(t) \delta \tilde{\Psi} + \delta u b_1(t) + \delta \omega b_2(t) \quad (2.18)$$

où $\delta \tilde{\Psi}$ évolue sur l'espace tangent au point $\tilde{\Psi}$ à la sphère \mathbb{S}^{2n-1} : $\delta \tilde{\Psi}(t)$ est un élément de

$$\tilde{\mathbf{T}}^{2n-1}(t) = \{v \in \mathbb{R}^{2n} \mid (v, \tilde{\Psi}_r(t))_{\mathbb{R}^{2n}} = 0\}.$$

Les fonctions du temps u_r et ω_r étant analytiques, les fonctions $\tilde{\Psi}_r(t)$, $A(t)$, $b_1(t)$ et $b_2(t)$ le sont aussi. Donc, à l'aide du critère de Kalman généralisé pour les systèmes linéaires dépendants du temps [117], la contrôlabilité de (2.18) est équivalente à la relation :

$$\text{span} \left(\text{Image} \left(\left[A(t) - \frac{d}{dt} \right]^i B(t) \right); i \in \mathbb{N} \right) = \tilde{\mathbf{T}}^{2n-1}(t). \quad (2.19)$$

Comme la dépendance par rapport au temps t est analytique, la contrôlabilité du système tangent autour du temps t_0 est équivalente à la contrôlabilité autour de tout temps t .

Théorème 4. *Considérons (2.16) où*

$$[0, +\infty) \ni t \mapsto (\tilde{\Psi}_r(t), u_r(t), \omega_r)$$

est une trajectoire de référence adiabatique analytique. Nous avons les deux propositions suivantes :

1. *Supposons qu'il existe $\eta > 0$ tel que*

$$\forall \tilde{\Psi}(0) \in \mathbb{S}^{2n-1}, \text{ avec } \|\tilde{\Psi}(0) - \tilde{\Psi}_r(0)\| \leq \eta.$$

nous avons

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|\tilde{\Psi}(t) - \tilde{\Psi}_r(t)\| = 0.$$

Alors le système linéaire tangent (2.18) est contrôlable.

2. Supposons que $\forall i \in \mathbb{N}$, $\sup_{t \geq 0} |u_r^{(i)}(t)| < +\infty$ et $\sup_{t \geq 0} |\omega_r^{(i)}(t)| < +\infty$. Supposons, de plus, qu'il existe une séquence $\{t_k\}_{k=1}^{\infty}$ avec $\lim_{k \rightarrow \infty} t_k = \infty$ telle que $\lim_{k \rightarrow +\infty} \tilde{\Psi}_r(t_k)$ existe et est égale à $\tilde{\Psi}_r^\infty \in \mathbb{S}^{2n-1}$ et telle que $\forall i \in \mathbb{N}$

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \left(\left[A - \frac{d}{dt} \right]^i B \right) \Big|_{t=t_k}$$

existe et est égale à B_i^∞ (A et B sont définies par (2.17)). Supposons finalement que l'espace vectoriel engendré par $\tilde{\Psi}_r^\infty$ et les images de tous les opérateurs B_i^∞ coïncident avec \mathbb{R}^{2n} . Alors

$$\forall \tilde{\Psi}(0) \in \mathbb{S}^{2n-1} \setminus \{-\tilde{\Psi}_r\}, \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \|\tilde{\Psi}(t) - \tilde{\Psi}_r(t)\| = 0.$$

Les hypothèses de la Proposition (2) sont assez techniques mais nous ne voyons pas de simplification pour l'instant. La contrôlabilité du système linéaire tangent autour de chaque temps $t > 0$, sans hypothèses sur le comportement asymptotique lorsque $t \rightarrow \infty$, ne donne pas la convergence de Ψ vers Ψ_r . De plus, le principe d'invariance de LaSalle devient problématique lorsque la dépendance par rapport au temps n'est pas quasi-périodique. Ces hypothèses peuvent être interprétées comme une contrôlabilité asymptotique du système linéaire tangent (2.18) lorsque $t \rightarrow +\infty$.

Notez que quand la trajectoire analytique de référence $(\tilde{\Psi}_r, u_r, \omega_r)$ est quasi-périodique, la contrôlabilité de (2.18) implique toutes les hypothèses de la Proposition (2).

La preuve du Théorème (4) est fondée sur une application itérative du Lemme de Barbalat :

Toute fonction uniformément continue $f : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ telle que la limite $\lim_{t \rightarrow +\infty} \int_0^t f(s) ds$ existe, converge nécessairement vers 0 quand $t \rightarrow +\infty$.

Démonstration du Théorème 4 :

Considérons la Proposition (1) et supposons que le système linéaire tangent n'est pas contrôlable. Prenons $t_0 > 0$. Alors, il existe $v \in \mathbb{S}^{2n-1}$ orthogonal à $\tilde{\Psi}_r(t_0)$ tel que

$$\begin{aligned} B_{t=t_0}^T v &= 0 \\ \forall i \in \mathbb{N}, \quad \left(\left(A - \frac{d}{dt} \right)^i B \right)_{t=t_0}^T v &= 0. \end{aligned}$$

Pour tout $\eta > 0$, la solution $\tilde{\Phi} \in \mathbb{S}^{2n-1}$ de

$$\frac{d}{dt} \tilde{\Phi} = (G_0 + u_r G_1 + \omega_r) \tilde{\Phi}$$

avec la condition initiale $(\tilde{\Psi}_r(t_0) + \eta v) / \sqrt{1 + \eta^2}$ à l'instant $t = t_0$, correspond à une trajectoire en boucle fermée. Les applications

$$t \mapsto \left(G_1 \tilde{\Phi}, \tilde{\Psi}_r \right)_{\mathbb{R}^{2n}}, \quad \text{et} \quad t \mapsto \left(G_2 \tilde{\Phi}, \tilde{\Psi}_r \right)_{\mathbb{R}^{2n}}$$

sont analytiques et toutes leurs dérivées à $t = t_0$ s'annulent. Alors elles sont identiquement nulles : le contrôle en boucle fermée u coïncide avec u_r et ω avec ω_r . Comme $\|\tilde{\Phi} - \tilde{\Psi}_r\|$ est toujours égal à η , ce qui n'est pas compatible avec l'hypothèse de la Proposition (1) du théorème.

Montrons maintenant la Proposition (2). Prenons

$$f_1(t) = \left(G_1 \tilde{\Psi}(t), \tilde{\Psi}_r(t) \right)_{\mathbb{R}^{2n}}, \quad f_2(t) = \left(G_2 \tilde{\Psi}(t), \tilde{\Psi}_r(t) \right)_{\mathbb{R}^{2n}}.$$

Comme u_r , ω_r et toutes leurs dérivées sont bornées, $t \mapsto \tilde{\Psi}_r(t)$ et $t \mapsto \tilde{\Psi}(t)$ et toutes leurs dérivées par rapport au temps sont bornées pour $t \in [0, \infty)$. Donc toutes les dérivées de f_1 et de f_2 sont uniformément continues sur $[0, \infty)$ ainsi qu'uniformément bornées. La fonction de Lyapounov V est définie positive et décroissante le long de la trajectoire $\tilde{\Psi}(t)$:

$$\frac{d}{dt}V = -a(f_1(t))^2 - b(f_2(t))^2.$$

Prenons $i = 1$ ou 2 . Suite au Lemme de Barbalat, $f_i(t)$ converge vers 0 lorsque t tend vers $+\infty$. Comme $f_i(t) = f_i(0) + \int_0^t \dot{f}_i$ et que f_i uniformément continue, \dot{f}_i tend vers 0. Par récurrence toutes les dérivées de f_i convergent vers 0. Un calcul standard donne alors

$$\forall \nu \in \mathbb{N} \quad f_i^{(\nu)} = \left(\widetilde{\Delta\Psi}, \left(\frac{d}{dt} - A^{\nu-1} b_i \right) \right)_{\mathbb{R}^{2n}}$$

où $\widetilde{\Delta\Psi} = \tilde{\Psi} - \tilde{\Psi}_r$. Donc pour tout $\nu \in \mathbb{N}$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \left(\widetilde{\Delta\Psi}(t), \left(\left[\frac{d}{dt} - A \right]^{\nu-1} b_i \right) (t) \right)_{\mathbb{R}^{2n}} = 0. \quad (2.20)$$

Supposons que $\widetilde{\Delta\Psi}$ ne converge pas vers 0. Comme $\|\widetilde{\Delta\Psi}\|(t)$ est une fonction décroissante du temps cela implique l'existence d'une constante $\alpha > 0$ telle que $\|\widetilde{\Delta\Psi}\|(t) > \alpha$ pour tout $t > 0$. Prenons, maintenant, la suite $\{t_k\} : \widetilde{\Delta\Psi}(t_k)$ est bornée dans \mathbb{R}^{2n} . Alors on peut extraire une sous-suite de $\{t_k\}$ (qu'on notera toujours $\{t_k\}_{k=1}^\infty$ pour simplifier les notations) telle que $\widetilde{\Delta\Psi}(t_k)$ converge vers $\widetilde{\Delta\Psi}^\infty$ lorsque $k \rightarrow \infty$. Nous avons $\|\widetilde{\Delta\Psi}^\infty\| \geq \alpha$.

Passant à la limite pour (2.20), nous obtenons :

$$B_\nu^\infty \widetilde{\Delta\Psi}^\infty = 0 \quad \forall \nu \in \mathbb{N}.$$

La dernière hypothèse de la proposition (2) implique alors que $\widetilde{\Delta\Psi}^\infty$ est co-linéaire à $\tilde{\Psi}_r^\infty$, car l'image de chaque B_ν^∞ est orthogonal à $\tilde{\Psi}^\infty$. Il existe alors $\beta \in \mathbb{R}$ telle que $\widetilde{\Delta\Psi}^\infty = \beta \tilde{\Psi}_r^\infty$. Prenons

$$\tilde{\Psi}^\infty = \lim_{k \rightarrow \infty} \tilde{\Psi}(t_k).$$

Alors $\tilde{\Psi}^\infty = (1 + \beta) \tilde{\Psi}_r^\infty$. Comme $\tilde{\Psi}^\infty$ et $\tilde{\Psi}_r^\infty$ appartiennent à \mathbb{S}^{2n-1} , nécessairement $\beta = 0$ ou bien $\beta = -2$. Le cas $\beta = -2$ est impossible car $\|\tilde{\Psi} - \tilde{\Psi}_r\|_{t=0} < 2$. Donc $\beta = 0$ et nous avons une contradiction. \square

2.3 Modèles de la chimie quantique

Cette section est consacrée aux applications de la méthode présentée dans la Section 2.1 à des modèles de la chimie quantique. Nous allons adapter cette méthode au problème de contrôle sous sa forme la plus considérée par les chimistes. Ensuite, nous verrons via des simulations comment cette méthode à des petites modifications près nous permet de résoudre des problèmes considérés difficiles par les chimistes. Nous allons en même temps expliquer via des arguments formels pourquoi ces méthodes sont plus efficaces que certaines autres. Finalement, nous améliorerons le résultat grâce à une utilisation conjointe de cette méthode et des méthodes itératives de contrôle optimal.

2.3.1 Problème de contrôle et méthode de Lyapounov

Le système que nous considérons obéit à l'équation de Schrödinger

$$i \frac{d}{dt} \Psi = [H_0 - \mu \epsilon(t)] \Psi, \quad \Psi|_{t=0} = \Psi_0 \quad (2.21)$$

où Ψ_0 est l'état initial, H_0 est l'Hamiltonien interne, μ est le moment dipolaire du système et $\epsilon(t)$ est l'intensité du champ externe. Notre objectif est de maximiser la valeur moyenne d'un opérateur O . Nous allons conserver le langage des fonctions d'onde dans cette section, mais on aurait pu exprimer également tous les calculs dans le formalisme de la matrice densité.

Ce problème a été traité sous une forme générale dans la référence [31], où l'objectif est de piloter la trajectoire pour que la valeur moyenne de O suive un chemin préétabli $S(t) : \langle \Psi(t) | O | \Psi(t) \rangle = S(t)$. Cette approche, appelée "tracking" par les chimistes, a été aussi étudiée dans les références [51] et [81]. Elle consiste à obtenir des champs de contrôles à partir de l'équation d'évolution de $S(t)$. Un défaut typique de ce genre de méthodes est que l'on rencontre souvent des singularités dans le processus d'inversion. Les singularités sont classifiées et étudiées dans les références [106] et [108]. Une méthode pour étudier ces singularités est présentée dans [108].

Une approche similaire a été introduite dans [122] : elle est fondée sur l'application des méthodes d'optimisation, locales en temps, pour les systèmes linéaires autonomes .

Finalement, dans les références [67] et [121], une approche originale fondée sur des techniques de Lyapounov a été introduite. La méthode consiste à utiliser un indice de performance $y(t)$ qui traduit la propriété physique désirée :

$$y(t) = y \left(\langle \tilde{O}_1(t) \rangle, \dots, \langle \tilde{O}_N(t) \rangle \right). \quad (2.22)$$

Ici, $\langle \tilde{O}_j(t) \rangle$ pour $j \in \{1, 2, \dots, N\}$ est la valeur moyenne de l'observable physique donné par l'opérateur Hermitien $\tilde{O}_j(t)$ qui évolue selon l'équation de mouvement

$$\frac{d}{dt} \tilde{O}_j(t) = i[\tilde{O}_j, H_0]. \quad (2.23)$$

Le champ de contrôle est alors choisi pour assurer la croissance de l'indice de performance $y(t)$. Un simple calcul montre que

$$\frac{dy(t)}{dt} = -\epsilon(t) \sum_{i=1}^N \frac{\partial y(t)}{\partial \langle \tilde{O}_j(t) \rangle} \langle [\tilde{O}_j(t), \mu/i] \rangle.$$

Tout feedback de la forme

$$\epsilon(t) = K \left(t, - \sum_{i=1}^N \frac{\partial y(t)}{\partial \langle \tilde{O}_j(t) \rangle} \langle [\tilde{O}_j(t), \mu/i] \rangle \right)$$

où $K(t, s) = \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction régulière telle que

$$sK(t, s) \geq 0 \forall s \in \mathbb{R} \quad K(t, s) = 0 \Leftrightarrow s = 0$$

assure $dy/dt \geq 0$. Dans le cas particulier où $y(t)$ est la valeur moyenne de l'opérateur de projection $|\phi\rangle\langle\phi|$ sur un état propre ϕ de l'Hamiltonien interne, cela est équivalent à choisir un feedback de la forme

$$\epsilon(t) = K(t, \mathfrak{S}(\langle \mu\Psi, \phi \rangle \langle \phi, \Psi \rangle)). \quad (2.24)$$

Comme nous allons voir avec l'analyse formelle et comme le montrent les simulations de la sous-section suivante, ce contrôle de Lyapounov prend seulement en compte les transitions de premier ordre. C'est l'analogie du résultat du Théorème 1 de la Section 2.1. Dans le cas où tous les états propres de H_0 sont couplés via le moment dipolaire μ , ce champ de contrôle est efficace. Cependant il est impuissant à amener le système à son état cible lorsque certains états ne sont pas couplés directement et qu'il existe des transitions d'ordre plus élevé. En fait, comme on l'a vu dans la Section 2.1 les trajectoires convergent vers un sous-espace de dimension supérieure à 1. Des simulations numériques corroborant ce résultat sont présentées dans la sous-section suivante.

Dans la Section 2.1, pour améliorer ce résultat de convergence nous avons considéré une trajectoire de référence adiabatique. Ici, nous présentons une autre approche, à titre d'illustration, qui prend en compte les transitions multi-photoniques. Dans un premier temps nous utilisons la formulation générale de la théorie du contrôle cohérent local. Ensuite nous donnerons quelques simulations pour le cas particulier de l'opérateur de projection. Notre procédure identifie automatiquement les parcours multi-photoniques nécessaires au système pour atteindre la cible.

Même si les opérateurs \tilde{O}_j ne sont pas des constantes du temps, ils sont des invariants du système libre sans contrôle [79]. L'idée est de définir des opérateurs de référence dont la dépendance par rapport au système libre n'est pas stationnaire et qui deviennent égaux aux opérateurs désirés O_j après un temps T suffisamment grand. L'analyse formelle montre comment l'application des trajectoires de référence non-stationnaires permet de prendre en compte les transitions de degré plus élevé.

Prenons les observables $\tilde{O}_j(t)$ dont la dépendance par rapport au temps est donnée par l'équation de mouvement suivante :

$$\frac{d\tilde{O}_j}{dt} = i[\tilde{O}_j, H_0 - f(t)\mu], \quad \tilde{O}_j(t = T) = O_j \quad (2.25)$$

où $f(t)$ est un champ de référence, non identiquement nul, et tel que $f(t) = 0$ pour tout $t \geq T$. En dérivant formellement de l'équation (2.22), nous obtenons

$$\frac{dy}{dt} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial y(t)}{\partial \langle \tilde{O}_j(t) \rangle} \frac{d \langle \tilde{O}_j(t) \rangle}{dt} = -(\epsilon(t) - f(t)) \sum_{j=1}^N \frac{\partial y(t)}{\partial \langle \tilde{O}_j(t) \rangle} \langle [\tilde{O}_j(t), \mu/i] \rangle.$$

Donc, tout feedback de la forme

$$\epsilon(t) = f(t) + K \left(t, - \sum_{i=1}^N \frac{\partial y(t)}{\partial \langle \tilde{O}_j(t) \rangle} \langle [\tilde{O}_j(t), \mu/i] \rangle \right)$$

où $K(t, s)$ vérifie les conditions citées plus haut, fait croître la valeur de l'indice de performance $y(t)$.

Considérons maintenant le cas où l'indice de performance est la valeur moyenne d'un observable physique. Nous prenons

$$y(t) = \langle \tilde{O}(t) \rangle$$

où $\tilde{O}(t)$ vérifie l'équation (2.25) avec la condition finale $\tilde{O}(t = T) = O_f$. Une question importante est la suivante : quand est-ce que le système s'arrête avant d'atteindre la valeur maximale de l'indice de performance ?

Dans la Section 2.2, nous avons analysé la convergence pour le cas où l'observable physique correspond à un opérateur de projection sur un état propre de H_0 . Ici, nous redonnons d'une façon très formelle les mêmes arguments pour le cas général d'un observable physique mais dont la trajectoire de référence est stationnaire ($f(t) \equiv 0$).

Formellement la valeur moyenne $\langle \tilde{O} \rangle$ arrête sa croissance, quand le champ de contrôle devient uniformément égal au champ de référence $f(t) \equiv 0$. Cela arrive si et seulement si $\epsilon(t)$ et toutes ses dérivées sont nuls :

$$\left\langle [\tilde{O}, ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i}] \right\rangle = \langle \Psi | [\tilde{O}, ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i}] | \Psi \rangle = 0 \quad \forall k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.26)$$

Ici, $ad_Z^m(Y)$ est la notation pour les commutateurs itératifs

$$ad_Z^0(Y) = Y \quad ad_Z^m(Y) = [Y, ad_Z^{m-1}(Y)] \quad \text{pour } m \geq 1.$$

En fait $\epsilon = 0$ implique $\langle \tilde{O}, \mu/i \rangle = 0$. En général, nous pouvons montrer que

$$\frac{d^j}{dt^j} \epsilon = (-1)^j \left\langle [\tilde{O}, ad_{\mu/i}^j \frac{H_0}{i}] \right\rangle \quad \text{pour } j = 0, 1, 2, \dots \quad (2.27)$$

Dans ce but, supposons que l'équation (2.27) est satisfaite pour $j \leq k$. Ensuite,

$$\begin{aligned} \frac{d^{k+1}}{dt^{k+1}} \epsilon &= (-1)^k \frac{d}{dt} \left\langle \left[\tilde{O}, ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i} \right] \right\rangle \\ &= (-1)^k \left\langle \left[\left[\tilde{O}, ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i} \right], \frac{H_0}{i} \right] \right\rangle + (-1)^k \left\langle \left[\frac{d}{dt} \tilde{O}, ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i} \right] \right\rangle \\ &= (-1)^k \left\langle \left[\left[\tilde{O}, ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i} \right], \frac{H_0}{i} \right] \right\rangle - (-1)^k \left\langle \left[\left[\tilde{O}, \frac{H_0}{i} \right], ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i} \right] \right\rangle \\ &= (-1)^k \left\langle \left[\left[\tilde{O}, ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i} \right], \frac{H_0}{i} \right] \right\rangle + (-1)^k \left\langle \left[\left[\frac{H_0}{i}, \tilde{O} \right], ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i} \right] \right\rangle \\ &= (-1)^{k+1} \left\langle \left[\left[ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i}, \frac{H_0}{i} \right], \tilde{O} \right] \right\rangle \\ &= (-1)^{k+1} \left\langle \left[ad_{\mu/i}^{k+1} \frac{H_0}{i}, \tilde{O} \right] \right\rangle \end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'identité de Jacobi pour les crochets de Lie.

Nous écrivons le système dans la base propre correspondant à la matrice Hermitienne H_0 . Donc, H_0 est diagonale, $H_0 = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ et pour tout $k \geq 1$

$$ad_{\mu/i}^k \frac{H_0}{i} = \left(\frac{1}{i} \right)^{k+1} [(\lambda_i - \lambda_j)^k \mu_{ij}]. \quad (2.28)$$

En utilisant (2.27), l'équation (2.26) devient

$$\begin{aligned} \sum (\lambda_i - \lambda_j)^k \mu_{ij} (\bar{\Psi}_i \Phi_j + \bar{\Psi}_j \Phi_i - \bar{\Phi}_j \Psi_i - \bar{\Phi}_i \Psi_j) &= 0 \quad \forall k \in \{0, 2, 4, \dots\} \\ \sum (\lambda_i - \lambda_j)^k \mu_{ij} (\bar{\Psi}_i \Phi_j - \bar{\Psi}_j \Phi_i + \bar{\Phi}_j \Psi_i - \bar{\Phi}_i \Psi_j) &= 0 \quad \forall k \in \{1, 3, 5, \dots\} \end{aligned} \quad (2.29)$$

où $\Phi = \tilde{O}\Psi$. Alors sous l'hypothèse [130]

A1 H_0 n'admet pas de transitions dégénérées, i.e., $\lambda_i - \lambda_j \neq \lambda_a - \lambda_b$, pour $(i, j) \neq (a, b)$; l'équation (2.29) devient

$$\mu_{ij} (\bar{\Psi}_j \Phi_i - \Psi_i \bar{\Phi}_j) = 0 \quad \forall i \neq j \in \{1, 2, \dots, N\}. \quad (2.30)$$

Donc, si

A2 pour tout $i \neq j \in \{1, 2, \dots, N\}$, le coefficient μ_{ij} ne s'annule pas ($\mu_{ij} \neq 0$); alors Φ doit être proportionnel à Ψ : Ψ doit être un état propre de l'observable physique \tilde{O} . Sous les hypothèses **A1** et **A2**, l'algorithme arrête de converger vers la valeur maximale de la valeur moyenne de \tilde{O} seulement sur les états propres de l'opérateur \tilde{O} . Cependant, comme seul l'état propre associé à la valeur propre maximale est stable, le système ne peut s'arrêter que sur cet état propre. Dans le langage de la matrice densité, la même analyse montre que les points d'arrêt commutent nécessairement avec l'observable \tilde{O} .

Considérons maintenant, le cas où l'hypothèse **A2** n'est pas satisfaite. Cela se traduit par le fait que certains états propres de H_0 ne sont pas couplés via des transitions simples mono-photoniques. Cette situation se produit pour plusieurs molécules contrôlables. Nous verrons que dans ce cas-là l'algorithme avec le champ de référence $f \equiv 0$, ne permet pas d'atteindre la valeur maximale de $\langle \tilde{O} \rangle$. Le fait d'ajouter un champ de référence non-nul, perturbe d'une certaine façon l'Hamiltonien libre du système et donc, en général, les hypothèses **A1** et **A2** seront satisfaites. Pour avoir des perturbations efficaces dans le régime des champs faibles, on doit choisir un champ de référence résonnant. Dans le régime des champs forts, ceci n'est pas nécessaire.

Dans la suite de cette section et pour les simulations, nous allons nous restreindre au cas où l'observable \tilde{O} correspond à la projection sur un état propre $|\phi\rangle$ d'énergie λ de H_0 (le cas étudié dans les section précédentes). L'opérateur \tilde{O} est donc l'opérateur de projection $|\phi\rangle\langle\phi|$. Alors en utilisant la trajectoire de référence

$$i \frac{d}{dt} \Psi_r = (H_0 - f(t)\mu) \Psi_r, \quad \Psi_r(T) = \phi, \quad (2.31)$$

et la méthode de Lyapounov pour avoir un indice de performance $|\langle \Psi(t), \Psi_r(t) \rangle|^2$ croissant, nous obtenons le feedback suivant :

$$\epsilon(t) = f(t) + K(t, \Im(\langle \mu \Psi, \Psi_r \rangle \langle \Psi_r, \Psi \rangle)). \quad (2.32)$$

Les simulations numériques de la sous-section suivante montrent comment l'application d'un champ de référence non-nul enlève la dégénérescence quand l'une au moins des hypothèses n'est pas vérifiée.

2.3.2 Simulations numériques

Considérons le système à cinq états (déjà étudié dans la littérature [109, 126, 130]) où l'Hamiltonien H_0 et le moment dipolaire μ sont donnés par

$$H_0 = \begin{pmatrix} 1.0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1.2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1.3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2.0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2.15 \end{pmatrix} \quad \mu = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

Ce système est contrôlable : l'algèbre de Lie engendrée par H_0/i et μ/i est $u(5)$ [109]. Supposons que le but du contrôle est de ramener la fonction d'onde du système sur le premier état propre $\phi = (1, 0, 0, 0, 0)^T$ de H_0 correspondant à l'énergie 1. En utilisant l'opérateur stationnaire de projection sur le premier état propre $\tilde{O}(t) = |\phi\rangle\langle\phi|$, nous avons le champ de contrôle suivant :

$$\epsilon(t) = K(t, \mathfrak{S}(\langle\mu\Psi, \phi\rangle\langle\phi, \Psi\rangle)) = K(t, \mathfrak{S}(\Psi_1(\Psi_4^*(t) + \Psi_5^*(t)))). \quad (2.34)$$

Supposons que l'état initial est une combinaison linéaire de trois premiers états propres correspondant aux énergies 1, 1.2 et 1.3. Bien évidemment, pour un tel état initial, le champ de contrôle trouvé par la méthode de Lyapounov s'annule et l'état du système ne converge pas vers l'état cible désiré. Même si les populations des états propres ϕ_4 et ϕ_5 (qui sont en transitions directes avec ϕ_1) ne sont pas nulles dans l'état initial, la trajectoire du système ne converge que vers l'espace propre engendré par ϕ_1 , ϕ_2 et ϕ_3 (ce qui correspond à la variété d'équilibre du système). Les simulations de la Figure (2.4) illustrent ce fait. L'état initial est $1/\sqrt{3}(1, 0, 1, 1, 0)$ et la fonction $K(t, s)$ est simplement

$$K(t, s) = \sigma(t)s$$

avec $\sigma(t)$ une enveloppe Gaussienne centrée autour de $T/2 = 250$. Pour résoudre l'équation de Schrödinger entre t et $t + dt$, nous calculons simplement le propagateur $\exp(i(H_0 - \epsilon(t)\mu)dt)$.

La fonction d'onde du système Ψ arrête de converger vers l'état cible ϕ_1 après avoir atteint une population de 60%. Remarquez que l'algorithme avec le champ de référence nul force le champ de contrôle $\epsilon(t)$ à être zéro à partir du temps $t = 300$. En effet le feedback $\mathfrak{S}(\langle\mu\Psi, \phi\rangle\langle\phi, \Psi\rangle)$ tend vers 0 indépendamment du choix de $K(t, s) = \sigma(t)s$. En fait, à $t = 300$, $\sigma(t)$ prend une valeur proche de son maximum. On remarque le même genre de comportement pour d'autres choix de $K(t, s)$. De plus, si on augmente le temps total de simulation T , la molécule sera encore "piégée" dans le même état. Dans la référence [121], une méthode a été proposée pour accélérer la convergence vers l'état cible. Elle consiste à définir un indice de performance de la forme

$$y(t) = \sum_{i=1}^5 \alpha_i \langle P_i \rangle \quad (2.35)$$

où $P_i = |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ est l'opérateur de projection sur le i 'ième état propre de l'Hamiltonien libre et α_1 est choisi plus grand que les autres coefficients. Ce changement rend la convergence plus efficace lorsque l'interaction entre les états est faible. Mais, en général, la méthode admet le même défaut qu'auparavant, ce que nous illustrons à l'aide d'une autre simulation. Prenons la même condition initiale $\Psi_0 = 1/\sqrt{3}(1, 0, 1, 1, 0)$. En utilisant alors les proportions $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5) = (10, 1, 1, 1, 7)$, on obtient le résultat de la Figure 2.5, qui ressemble beaucoup au résultat de la simulation précédente. Nous avons utilisé de plus le

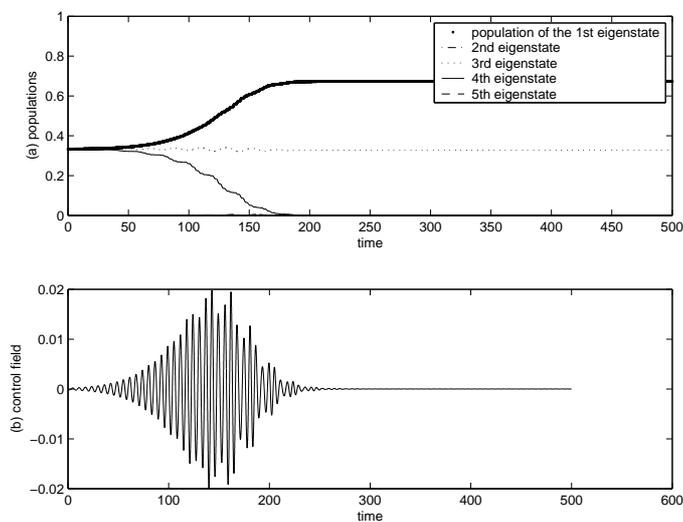


FIG. 2.4 – (a) : le carré de la norme de la projection de la trajectoire du système $\Psi(t)$ avec un feedback de la forme (2.34) sur les différents états propres du système i.e. $|\langle \Psi(t), \phi_i \rangle|^2$; (b) : le champ de contrôle trouvé par (2.34) où $K(t, s) = \sigma(t)s$ avec $\sigma(t) = 1/4 \exp(-.1e - 3(t - T/2)^2)$ (Système à 5 états (2.33)).

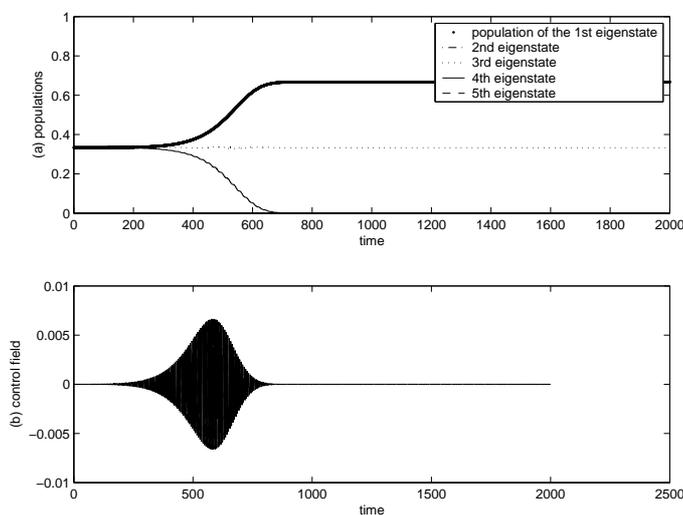


FIG. 2.5 – (a) : le carré de la norme de la projection de la trajectoire du système $\Psi(t)$ utilisant l'indice de performance (2.35), sur les différents états propres; (b) : le champ de contrôle (système à 5 états (2.33)).

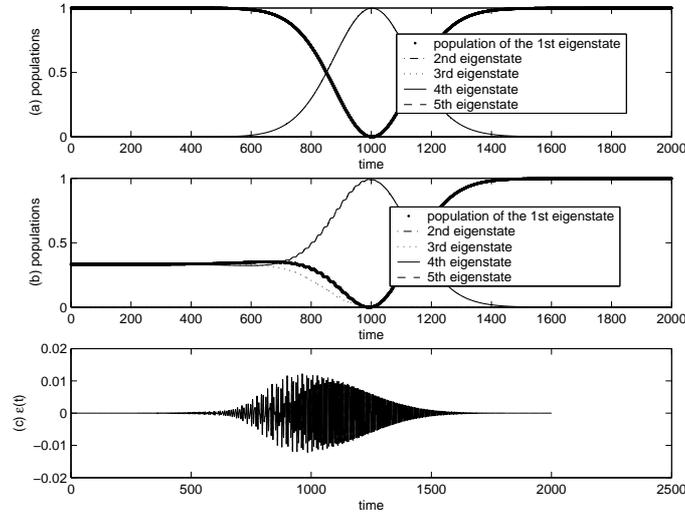


FIG. 2.6 – (a) : le carré de la norme de la projection de la trajectoire de référence $\Psi_r(t)$ solution de (2.31); (b) : le carré de la norme de la projection de la trajectoire du système $\Psi(t)$ utilisant le feedback (2.32), sur les différents états propres du système; (c) : le champ de contrôle retrouvé par (2.32) où $f(t) = \sigma(t) \sin(t)$ et $K(t, s) = \sigma(t)s$ avec $\sigma(t) = .01 \exp(-.1e - 4(t - T/2)^2)$ (système à 5 états (2.33)).

même feedback $K(t, s)$. Maintenant, considérons un champ de référence non-nul $f(t)$. Les simulations de la Figure 2.6 correspondent à $f(t) = \sigma(t) \sin(t)$, où $\sigma(t)$ est une enveloppe Gaussienne centrée autour de $t = T/2 = 1000$. L'état initial est encore $1/\sqrt{3}(1, 0, 1, 1, 0)$ et le feedback est donné par $K(t, s) = \sigma(t)s$. Le champ de contrôle s'annule à partir du temps $t = 900$, ce qui n'est pas dû à la forme spéciale de $K(t, s)$: mais au fait que le feedback converge vers 0 et que la molécule est piégée.

Une autre situation posant des problèmes pour le cas d'un champ de référence stationnaire, est le cas où H_0 admet un spectre dégénéré. Nous considérons ici un système à 4 états [52, 101, 102, 130] (voir aussi la référence [110]- page 152)

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & .004556 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.095683 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.095683 \end{pmatrix} \quad \mu = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

L'état cible est $(0, 0, 0, 1)$ dans l'espace propre correspondant à la valeur propre double 0.095683. La Figure 2.7 montre des résultats de simulation où la trajectoire de référence est donnée par la fonction $f = \sigma(t)(\sin(\omega_1 t) + \sin(\omega_2 t))$, avec σ une enveloppe Gaussienne centrée autour de $T/2 = 1.5e + 5$ et ω_1 et ω_2 les fréquences de transition. L'état initial est $\Psi_0 = 1/2(1, 1, 1, 1)$, et le terme de feedback est donné par $K(t, s) = 10\sigma(t)s$. Les deux

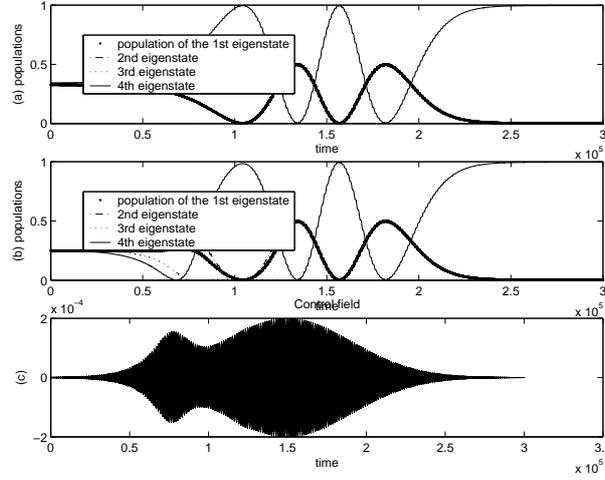


FIG. 2.7 – (a) : le carré de la norme de la projection de la trajectoire de référence $\Psi_r(t)$ solution de (2.31) ; (b) : le carré de la norme de la projection de la trajectoire du système $\Psi(t)$ utilisant le feedback (2.32), sur les différents états propres du système ; (c) : le champ de contrôle trouvé par (2.32) où $f(t) = \sigma(t)(\sin(\omega_1 t) + \sin(\omega_2 t))$ et $K(t, s) = 10 \sigma(t)s$ avec $\omega_1 = .095683$, $\omega_2 = .095683 - .004556$ et $\sigma(t) = .1e - 3 \exp(-.3e - 9(t - T/2)^2)$ (système à 4 états (2.36)).

systèmes considérés ici, sont des systèmes typiques de dimension finie déjà présentés dans la littérature. Le temps de convergence et l'intensité du champ trouvés par la méthode de Lyapounov sont cohérents avec les valeurs trouvées par d'autres algorithmes.

Remarquez qu'exactement la même méthode peut être utilisée dans les situations où le spectre est continu et où alors le système est de dimension infinie. Dans ce cas-là, les simulations numériques peuvent être réalisées, à l'aide d'une méthode de split-opérateur de troisième ordre [41]. Toutefois, dans la Section 2.5, nous allons voir qu'une analyse de convergence dans la configuration de dimension infinie est nettement plus difficile.

2.3.3 Un algorithme monotone

Malheureusement, pour la méthode étudiée dans la sous-section précédente, nous ne disposons pas d'estimation pour le temps de convergence. Cependant, nous avons observé que le temps requis pour la convergence de l'algorithme est du même ordre de grandeur que celui d'autres méthodes comme par exemple celle du "tracking" conventionnel ou celle du contrôle optimal. Pour une configuration donnée, la méthode ne permet pas d'atteindre un voisinage particulier de l'état cible à l'instant T . Il existe deux approches pour résoudre ce problème. S'il n'y a pas de restriction sur le temps total T , nous pouvons tout simplement augmenter la valeur de ce temps total de simulation et comme nous avons la convergence

asymptotique, nous pouvons espérer atteindre n'importe quel voisinage de l'état cible. Sinon, nous pouvons utiliser une méthode itérative pour obtenir de meilleurs résultats à chaque étape. En utilisant la formulation générale de la théorie du contrôle cohérent avec un indice de performance, nous obtenons l'algorithme suivant (un algorithme similaire peut être écrit dans le langage de la matrice densité) :

1. Prenons un champ de référence arbitraire $\epsilon^{(0)}(t)$ pour la trajectoire de référence de différents observables $\tilde{O}_j^{(0)}$ et utilisons la méthode de Lyapounov pour obtenir un premier candidat pour le champ de contrôle $\epsilon^1(t)$ et une trajectoire $\Psi^{(1)}$ du système pour $t \in [0, T]$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{O}_j^{(0)} &= i[\tilde{O}_j^{(0)}, H_0 - \epsilon^{(0)}(t) \mu], \\ \tilde{O}_j^{(0)}|_{t=T} &= O_j \quad \text{pour} \quad j \in \{1, 2, \dots, N\}. \\ i \frac{d}{dt} \Psi^{(1)} &= H_0 \Psi^{(1)} - \epsilon^{(1)}(t) \mu \Psi^{(1)}, \\ \Psi^{(1)}|_{t=0} &= \Psi_0. \end{aligned}$$

$$\epsilon^{(1)}(t) = \epsilon^{(0)}(t) + K(t, - \sum_{j=1}^N \frac{\partial y(t)}{\partial \langle \tilde{O}_j^{(0)}(t) \rangle} \langle \Psi^{(1)}(t) | [\tilde{O}_j^{(0)}(t), \mu/i] | \Psi^{(1)}(t) \rangle).$$

2. À la i 'ième étape ($i \geq 1$), prenons $\epsilon^{(i)}(t)$ comme champ de référence et trouvons des nouvelles trajectoires de référence pour les observables $\tilde{O}_j^{(i)}$ passant par O_j à l'instant $t = T$. Ensuite, mettons à jour le champ de contrôle en utilisant la méthode de Lyapounov. Nous obtenons un nouveau champ de contrôle $\epsilon^{(i+1)}(t)$ et la trajectoire correspondante $\Psi^{(i+1)}$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{O}_j^{(i)} &= i[\tilde{O}_j^{(i)}, H_0 - \epsilon^{(i)}(t) \mu], \\ \tilde{O}_j^{(i)}|_{t=T} &= O_j \quad \text{pour} \quad j \in \{1, 2, \dots, N\}. \\ i \frac{d}{dt} \Psi^{(i+1)} &= H_0 \Psi^{(i+1)} - \epsilon^{(i+1)}(t) \mu \Psi^{(i+1)}, \\ \Psi^{(i+1)}|_{t=0} &= \Psi_0. \end{aligned}$$

$$\epsilon^{(i+1)}(t) = \epsilon^{(i)}(t) + K(t, - \sum_{j=1}^N \frac{\partial y(t)}{\partial \langle \tilde{O}_j^{(i)}(t) \rangle} \langle \Psi^{(i+1)}(t) | [\tilde{O}_j^{(i)}(t), \mu/i] | \Psi^{(i+1)}(t) \rangle).$$

Nous pouvons montrer facilement que cet algorithme admet un comportement monotone, i.e.,

$$y(\{\langle \Psi^{(i+1)}(T) | O_j | \Psi^{(i+1)}(T) \rangle\}_{j=1}^N) \geq y(\{\langle \Psi^{(i)}(T) | O_j | \Psi^{(i)}(T) \rangle\}_{j=1}^N) \quad \forall i \geq 0. \quad (2.37)$$

En fait, comme $\epsilon^{(i+1)}(t)$ est choisi pour avoir une fonction $y(\langle \Psi^{(i+1)}(t) | \tilde{O}_j^{(i)}(t) | \Psi^{(i+1)}(t) \rangle_{j=1}^N)$ croissante, on doit avoir

$$\begin{aligned} y(\{\langle \Psi^{(i+1)}(T) | \tilde{O}_j^{(i)}(T) | \Psi^{(i+1)}(T) \rangle_{j=1}^N\}) &\geq y(\{\langle \Psi^{(i+1)}(0) | \tilde{O}_j^{(i)}(0) | \Psi^{(i+1)}(0) \rangle_{j=1}^N\}) \\ &= y(\{\langle \Psi_0 | \tilde{O}_j^{(i)}(0) | \Psi_0 \rangle_{j=1}^N\}) = y(\{\langle \Psi^{(i)}(T) | \tilde{O}_j^{(i)}(T) | \Psi^{(i)}(T) \rangle_{j=1}^N\}) \end{aligned}$$

où, pour la dernière égalité, nous avons utilisé le fait que les fonctions d'onde $\Psi^{(i)}(t)$ et les observables $\tilde{O}_j^{(i)}(t)$ évoluent selon le même couplage $\epsilon^{(i)}(t)$.

Alors les valeurs $\langle \Psi^{(i)}(t) | \tilde{O}_j^{(i)}(t) | \Psi^{(i)}(t) \rangle$ restent constantes. Finalement, $\tilde{O}_j^{(i)} = O_j$, ce qui implique l'inégalité (2.37).

2.4 Stabilisation sous les hypothèses relaxées

La stabilisation du système quantique

$$i \frac{d}{dt} \Psi = (H_0 + u(t)H_1)\Psi, \quad \Psi|_{t=0} = \Psi^0, \quad (2.38)$$

via les techniques de Lyapounov et la convergence de la méthode ont été étudiées dans la Section 2.1. Nous avons vu qu'un feedback de la forme (2.4) permet de stabiliser le système autour d'un état propre ϕ de l'Hamiltonien libre H_0 si les hypothèses de la proposition (2) du Théorème 1 sont vérifiées. Ces conditions correspondent à la contrôlabilité du système linéaire tangent autour de l'état stationnaire ϕ . De plus, nous avons vu dans la sous-section 2.1.5 qu'en considérant une trajectoire de référence adiabatique nous pouvons améliorer la situation et considérer le contrôle approché du système quantique. Mais de toute façon, cette méthode ne permet pas de stabiliser le système autour de l'état cible ϕ . Le but final de cette section est de traiter le problème de stabilisation quand les hypothèses de la sous-section 2.1.4 ne sont pas vérifiées. Comme nous avons vu par exemple dans la sous-section 2.1.3 ou dans la Section 2.3, cela peut arriver pour beaucoup de systèmes contrôlables. Nous allons toutefois supposer que si nous remplaçons l'Hamiltonien libre par une perturbation constante $H_0 + \bar{u}H_1$ et ϕ par $\phi_{\bar{u}}$ le vecteur propre correspondant, les hypothèses de la sous-section (2.1.4) vont être valables. L'idée est alors de définir une trajectoire de référence $\phi_{\gamma(t)}$, où $\gamma(t)$ est définie d'une façon implicite en utilisant l'état du système Ψ . Le but est de faire converger $\phi_{\gamma(t)}$ lentement vers ϕ , et en même temps d'utiliser un terme de feedback inspiré de la Section 2.1, pour stabiliser le système le plus vite possible autour de la trajectoire $\phi_{\gamma(t)}$ (voir la Figure 2.8). Cette stratégie a été introduite dans [35] pour la stabilisation de l'équation d'Euler incompressible. Dans [[35], page 1884, équations (3.47) et (3.48)], c'est $\gamma \nabla \theta$ qui joue le rôle de ϕ_γ .

Dans un premier temps (et pour des raisons techniques), nous changeons la fonction de Lyapounov introduite dans la Section 2.1 et nous prenons

$$V(\Psi) := 1 - |\langle \Psi, \phi \rangle|^2.$$

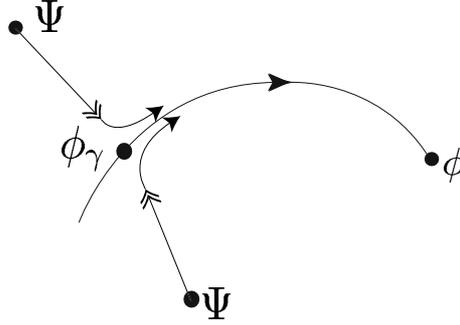


FIG. 2.8 –

Donc

$$\frac{d}{dt}V(\Psi) = -u(t)\mathfrak{S}(\langle H_1\Psi, \phi \rangle \langle \phi, \Psi \rangle). \quad (2.39)$$

Un terme de feedback de la forme

$$u(\Psi) := c\mathfrak{S}(\langle H_1\Psi, \phi \rangle \langle \phi, \Psi \rangle), \quad (2.40)$$

avec une constante positive c , assure $dV/dt \leq 0$.

Une analyse de convergence analogue à celle proposée dans la Section 2.1, montre que sous l'hypothèse additionnelle

A1 : La population de l'état propre ϕ dans l'état initial (et donc dans l'état du système à tout moment t) est non-nulle : $\langle \Psi, \phi \rangle \neq 0$;

la convergence de cette population vers 0 est encore équivalente à la contrôlabilité du linéarisé tangent autour de la trajectoire stationnaire.

Remarque 2. *Nous n'avons pas besoin d'ajouter le contrôle fictif $\omega(t)$ car la phase globale de la fonction d'onde $\Psi(t)$ ne sera pas vue par le terme de feedback (2.40).*

Remarque 3. *En pratique, l'hypothèse **A1** n'est pas vraiment restrictive. En effet, même si la population de l'état propre ϕ est nulle dans l'état initial, il suffit de perturber un peu le système au début, à l'aide de champs sinusoïdaux de fréquences résonnantes.*

Maintenant, considérons le cas où le système linéaire tangent n'est pas contrôlable. Les systèmes (2.7), (2.36) et (2.33) représentent un certain nombre de ces systèmes qui sont tous contrôlables.

Pour $\gamma \in \mathbb{R}$, notons $(\lambda_{n,\gamma})_{1 \leq n \leq N}$ les valeurs propres de l'opérateur $H_0 + \gamma H_1$, avec $\lambda_{1,\gamma} \leq \dots \leq \lambda_{N,\gamma}$ et $(\phi_{n,\gamma})_{1 \leq n \leq N}$ les vecteurs propres associés :

$$(H_0 + \gamma H_1)\phi_{n,\gamma} = \lambda_{n,\gamma}\phi_{n,\gamma}.$$

Pour simplifier les notations, nous prenons $\phi = \phi_k$ avec un $k \in \{1, 2, \dots, N\}$. Ensuite, nous considérons l'hypothèse

A2 : Il existe une constante positive γ^* telle que, pour tout $\gamma \in (0, \gamma^*]$, nous avons $\lambda_{1,\gamma} < \dots < \lambda_{N,\gamma}$ et pour tout entier $l \in \{1, 2, \dots, N\} \setminus \{k\}$, nous avons $\langle H_1 \phi_{k,\gamma}, \phi_{l,\gamma} \rangle \neq 0$.

L'idée est d'utiliser le fait que le terme de feedback présenté ci-dessus pour un Hamiltonien de la forme $H_0 + \gamma H_1$ et le moment dipolaire H_1 , force le système à converger vers

$$\mathcal{C}_\gamma := \{\phi_{k,\gamma} e^{i\theta}; \theta \in \mathbb{R}\}$$

pour tout $\gamma \in (0, \gamma^*]$ mais pas pour $\gamma = 0$. Donc, nous faisons converger γ vers 0. Formellement, la convergence vers \mathcal{C}_γ doit se faire plus rapidement que la convergence de γ vers 0 (Figure 2.8).

Il y a deux cas à considérer :

1. le cas où l'état cible ϕ_k est un état propre isolé de l'Hamiltonien libre H_0 : la dimension de l'espace propre correspondant est 1,
2. le cas dégénéré.

Nous allons considérer ces deux situations séparément.

2.4.1 État cible isolé

Nous supposons que le k 'ième espace propre de l'Hamiltonien libre H_0 est de dimension 1 et donc que l'état cible (i.e., le k 'ième état propre du système) est défini sans ambiguïté.

Définissons une fonction de Lyapounov

$$V(\Psi) := 1 - |\langle \Psi, \phi_{k,\gamma(\Psi)} \rangle|^2, \quad (2.41)$$

où l'application $\Psi \mapsto \gamma(\Psi)$ est implicitement définie par

$$\gamma(\Psi) = \theta(1 - |\langle \Psi, \phi_{k,\gamma(\Psi)} \rangle|^2) \quad (2.42)$$

pour une fonction réelle θ lentement variable.

Notons que sous l'hypothèse de non-dégénérescence du k 'ième état propre de $H_0 + \gamma H_1$ pour γ dans l'intervalle fermé $[0, \gamma^*]$, $\phi_{k,\gamma}$ et $\lambda_{k,\gamma}$ sont des fonctions analytiques du paramètre $\gamma \in [0, \gamma^*]$ [64](Théorème de Motzkin-Taussky, Page 85). En particulier, nous pouvons considérer la dérivée de l'application

$$\gamma \mapsto \phi_{k,\gamma}$$

au moins dans l'intervalle $[0, \gamma^*]$. Nous allons noter par

$$\left. \frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma} \right|_{\gamma_0}$$

la dérivée de cette application au point $\gamma = \gamma_0$. En outre, comme la dépendance de $\phi_{k,\gamma}$ par rapport à γ est analytique, $\frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma}$ est bornée dans $[0, \gamma^*]$. Alors

$$C := \max\{\|\frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma}|_{\gamma_0}\|; \gamma_0 \in [0, \gamma^*]\} < \infty.$$

Un calcul simple montre que

$$\frac{d}{d\gamma}\theta(1 - |\langle \Psi, \phi_{k,\gamma} \rangle|^2) = -2\theta' \Re \left(\left\langle \Psi, \frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma} \right\rangle \langle \phi_{k,\gamma}, \Psi \rangle \right).$$

En prenant une fonction θ telle que $\|\theta'\|_\infty$ est suffisamment petite (la petitesse dépend seulement de H_0, H_1, k et γ^*) et comme $\frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma}$ est bornée, la fonction

$$[0, \gamma^*] \ni \alpha \mapsto \theta(1 - |\langle \Psi, \phi_{k,\alpha} \rangle|^2)$$

pour un $\Psi \in \mathbb{S}$ fixé, sera contractante. Ainsi, pour tout $\Psi \in \mathbb{S}$ fixé, il existe une unique constante $\gamma(\Psi) \in [0, \gamma^*]$ telle que (2.42) est vérifiée.

Montrons alors que $\mathbb{S} \ni \Psi \mapsto \gamma(\Psi) \in [0, \gamma^*]$ définit une application dans $C^\infty(\mathbb{S}; [0, \gamma^*])$. Le théorème des fonctions implicites s'applique ici. Considérons l'application

$$F(\gamma, \psi) = \gamma - \theta(1 - |\langle \psi, \phi_{k,\gamma} \rangle|^2).$$

Cette application est régulière par rapport à γ et ψ et, pour un $\psi \in \mathbb{S}$ fixé, nous avons

$$F(\gamma(\psi), \psi) = 0.$$

De plus,

$$\frac{d}{d\gamma}F(\gamma, \psi) = 1 + 2\theta' \Re \left(\left\langle \psi, \frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma} \right\rangle \langle \phi_{k,\gamma}, \psi \rangle \right).$$

Cette expression est non-nulle pour θ tel que $\|\theta'\|_\infty$ est suffisamment petit. Alors, en utilisant le Théorème des fonctions implicites et l'unicité de l'application $\Psi \mapsto \gamma(\Psi)$, nous avons le résultat d'existence suivant :

Lemme 3. Prenons $\theta \in C^\infty(\mathbb{R}^+; [0, \gamma^*])$ telle que

$$\theta(0) = 0, \quad \theta(s) > 0 \quad \text{pour tout } s > 0, \quad (2.43)$$

$$\|\theta'\|_\infty < \frac{1}{C^*} \quad \text{où } C^* = 1 + \max\{\|\frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma}|_{\gamma_0}\|; \gamma_0 \in [0, \gamma^*]\}. \quad (2.44)$$

Alors, il existe une application unique $\gamma \in C^\infty(\mathbb{S}; [0, \gamma^*])$ telle que, pour tout $\Psi \in \mathbb{S}$,

$$\gamma(\Psi) = \theta(1 - |\langle \Psi, \phi_{k,\gamma(\Psi)} \rangle|^2) \quad \text{avec } \gamma(\phi_k) = 0.$$

Dans la suite, $\theta \in C^\infty(\mathbb{R}^+, [0, \gamma^*])$ est fixée et satisfait (2.43) et

$$\|\theta'\|_\infty \leq 1/2C^*. \quad (2.45)$$

Prenons Ψ une solution de l'équation

$$i\dot{\Psi} = (H_0 + (\gamma(\Psi) + v(t))H_1)\Psi.$$

Nous avons

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}V(\Psi(t)) &= -2v(t)\Im(\langle H_1\Psi(t), \phi_{k,\gamma} \rangle \langle \phi_{k,\gamma}, \Psi(t) \rangle) \\ &= -2\dot{\gamma}(t)\Re\left(\left\langle \Psi(t), \frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma}\Big|_{\gamma(t)} \right\rangle \langle \phi_{k,\gamma}, \Psi(t) \rangle\right). \end{aligned}$$

Un calcul simple montre que

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}(t) &= \theta'(V)\{-2v(t)\Im(\langle H_1\Psi(t), \phi_{k,\gamma} \rangle \langle \phi_{k,\gamma}, \Psi(t) \rangle) \\ &\quad 2\dot{\gamma}(t)\Re\left(\left\langle \Psi(t), \frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma}\Big|_{\gamma(t)} \right\rangle \langle \phi_{k,\gamma}, \Psi(t) \rangle\right)\}. \end{aligned}$$

Introduisons

$$K(t) = 2\theta'(V) \Re\left(\left\langle \Psi(t), \frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma}\Big|_{\gamma(t)} \right\rangle \langle \phi_{k,\gamma}, \Psi(t) \rangle\right).$$

Ainsi, avec (2.45), nous avons

$$|K(t)| \leq 1/2 \quad \text{pour tout } t \in [0, +\infty). \quad (2.46)$$

Nous avons

$$(1 + K(t))\dot{\gamma}(t) = -2\theta'(V)v(t)\Im(\langle H_1\Psi(t), \phi_{k,\gamma} \rangle \langle \phi_{k,\gamma}, \Psi(t) \rangle)$$

et alors

$$\frac{d}{dt}V(\Psi(t)) = -2v(t)\Im(\langle H_1\Psi(t), \phi_{k,\gamma} \rangle \langle \phi_{k,\gamma}, \Psi(t) \rangle)\left\{1 + \frac{\theta'(V)}{1 + K(t)}\right\}. \quad (2.47)$$

En utilisant (2.45), nous avons $\|\theta'\|_\infty \leq 1/2$, ce qui avec (2.46) implique

$$1 + \frac{\theta'(V)}{1 + K(t)} \geq 0 \quad \text{pour tout } t \geq 0.$$

Donc, un feedback de la forme

$$v(\Psi) = c\Im(\langle H_1\Psi, \phi_{k,\gamma(\Psi)} \rangle \langle \phi_{k,\gamma(\Psi)}, \Psi \rangle) \quad (2.48)$$

où c est une constante strictement positive $c > 0$, assure $dV/dt \leq 0$.

Le système en boucle fermée

$$i\dot{\Psi} = (H_0 + (\gamma(\Psi) + v(\Psi))H_1)\Psi$$

admet une solution globale dans \mathbb{R} car $\Psi \mapsto \gamma(\Psi)$ et $\Psi \mapsto v(\Psi)$ sont des fonctions Lipschitz de Ψ et $\|\Psi\| = 1$.

Une analyse de convergence de ce système en boucle fermée sous certaines hypothèses convenables est fournie dans la sous-section suivante. Le principe d'invariance de LaSalle sera utilisé, une fois de plus, pour caractériser l'ensemble ω -limite du système en boucle fermée.

2.4.2 Analyse de convergence

Le résultat principal de cette sous-section est le suivant

Théorème 5. *Prenons $\theta \in C^\infty(\mathbb{R}^+, [0, \gamma^*])$ telle que (2.43) et (2.45) sont vérifiées. Supposons aussi que*

H : *Il existe une constante positive γ^* telle que, pour tout $\gamma \in (0, \gamma^*]$, nous avons $\lambda_{1,\gamma} < \dots < \lambda_{N,\gamma}$ et que les valeurs $|\lambda_k - \lambda_j|$ pour $j \in \{1, \dots, N\}$ sont deux à deux différentes. Nous supposons de plus que pour tout entier $l \in \{1, 2, \dots, N\} \setminus \{k\}$, nous avons $\langle H_1 \phi_{k,\gamma}, \phi_{l,\gamma} \rangle \neq 0$ pour $\gamma \in (0, \gamma^*]$.*

Alors, le système en boucle fermée

$$i \frac{d}{dt} \Psi = (H_0 + u(\Psi)H_1)\Psi, \quad \Psi(0) = \Psi^0 \quad (2.49)$$

avec le feedback

$$u(\Psi) = \gamma(\Psi) + v(\Psi)$$

où la fonction $\gamma(\Psi)$ est donnée par le Lemme 3 et

$$v(\Psi) = c\mathfrak{S}(\langle H_1 \Psi, \phi_{k,\gamma(\Psi)} \rangle \langle \phi_{k,\gamma(\Psi)}, \Psi \rangle),$$

où c est une constante positive, admet une solution globale sur \mathbb{R}^+ .

De plus, si Ψ^0 satisfait

$$\langle \Psi^0, \phi_{k,\gamma(\Psi^0)} \rangle \neq 0 \quad (2.50)$$

alors la solution converge vers $\mathcal{C} = \{\phi_k e^{i\theta}; \theta \in \mathbb{R}\}$ au sens suivant

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \text{dist}(\Psi(t), \mathcal{C}) = 0$$

et l'ensemble $\{\Psi_0 \in \mathbb{S}; \langle \Psi_0, \phi_{k,\gamma(\Psi_0)} \rangle = 0\}$ est une variété invariante instable pour le système (2.49).

Démonstration du Théorème 5

Comme nous avons vu dans la sous-section précédente, $V(\Psi)$ est une fonction de Lyapunov et utilisant le feedback présenté dans le Théorème 5, nous avons $dV/dt \leq 0$ pour tout $t \in \mathbb{R}^+$.

Si $\langle \Psi^0, \phi_{k, \gamma(\Psi^0)} \rangle = 0$, on peut facilement voir que la deuxième partie du terme de feedback v s'annule et alors $\langle \Psi(t), \phi_{k, \gamma(\Psi(t))} \rangle = 0$, pour tout $t > 0$. Ainsi l'ensemble $\{\Psi_0 \in \mathbb{S}; \langle \Psi^0, \phi_{k, \gamma(\Psi^0)} \rangle = 0\}$ représente une variété invariante pour le feedback du Théorème 5.

Supposons maintenant que $\langle \Psi^0, \phi_{k, \gamma(\Psi^0)} \rangle \neq 0$ et utilisons le principe d'invariance de LaSalle : les trajectoires du système en boucle fermée convergent vers l'ensemble invariant le plus grand inclus dans $dV/dt = 0$.

Nous allons déterminer cet ensemble invariant. Prenons Ψ une solution de (2.49) telle que $dV/dt = 0$. Il existe une constante \bar{V} telle que $V(\Psi) = \bar{V}$. Cela implique que $\gamma(\Psi)$ est constante : $\gamma(\Psi) = \bar{\gamma}$ où $\bar{\gamma} = \theta(\bar{V})$. L'équation $dV/dt = 0$ implique

$$v(\Psi) = \Im(\langle H_1 \Psi, \phi_{k, \gamma(\Psi)} \rangle \langle \phi_{k, \gamma(\Psi)}, \Psi \rangle) = 0. \quad (2.51)$$

Donc la fonction Ψ résout

$$i \frac{d}{dt} \Psi = (H_0 + \bar{\gamma} H_1) \Psi.$$

Il y a deux cas à considérer :

Premier cas : $\bar{\gamma} = 0$. Nous avons $\theta(\bar{V}) = 0$ et donc utilisant (2.43), $\bar{V} = 0$ et

$$|\langle \Psi, \phi_k \rangle| = 1,$$

ce qui termine la preuve du théorème.

Deuxième cas : $\bar{\gamma} \neq 0$. Nous avons $0 < \bar{\gamma} < \gamma^*$. Des calculs similaires à ceux de la démonstration du Théorème (1) impliquent

$$\Re \left(\left\langle ad_{\frac{H_1}{i}}^m \left(\frac{H_0 + \bar{\gamma} H_1}{i} \right) \Psi, \phi_{k, \bar{\gamma}} \right\rangle \langle \phi_{k, \bar{\gamma}}, \Psi \rangle \right) = 0, \quad \forall m \in \{0, 1, 2, \dots\}. \quad (2.52)$$

Prenons $\chi = \langle \phi_{k, \bar{\gamma}}, \Psi \rangle \Psi$. Nous savons avec (2.50) que $\langle \phi_{k, \bar{\gamma}}, \Psi \rangle$ est non-nul pour tout temps $t \geq 0$ car c'est le cas pour $t = 0$. Alors (2.52) s'écrit

$$\Re \left(\left\langle ad_{\frac{H_1}{i}}^m \left(\frac{H_0 + \bar{\gamma} H_1}{i} \right) \chi, \phi_{k, \bar{\gamma}} \right\rangle \right) = 0, \quad \forall m \in \{0, 1, 2, \dots\}. \quad (2.53)$$

Comme dans la démonstration du Théorème 5, nous écrivons le système dans la base propre de $H_0 + \bar{\gamma} H_1$. Nous pouvons refaire exactement les même calculs que ceux de la Section 2.1, et en utilisant l'hypothèse **H** nous déduisons $\chi_2 = \chi_3 = \dots = \chi_N = 0$ et donc $\Psi_2 = \Psi_3 = \dots = \Psi_N = 0$. Cela implique que $\Psi \in \mathcal{C}$ et termine la preuve du théorème. \square

2.4.3 Cas dégénéré

Supposons que l'espace propre E_k , correspondant à la k 'ième valeur propre de l'Hamiltonien libre H_0 , est de dimension plus que 1. Nous allons toutefois supposer qu'en ajoutant une perturbation de la forme γH_1 , pour $\gamma \in (0, \gamma^*]$ à H_0 , nous enlevons la dégénérescence de la matrice. En fait, nous supposons que l'hypothèse **H** est toujours vérifiée.

Dans ce cas-là, parler de k 'ième état propre en tant qu'état cible admet une ambiguïté : ce k 'ième vecteur propre peut être n'importe quel vecteur dans l'espace propre E_k . Pour surmonter cette ambiguïté et aussi pour pouvoir refaire les calculs de la sous-section précédente, nous avons besoin d'un résultat de la théorie de perturbation pour les opérateurs auto-adjoints de dimension finie. Ce résultat est déjà fourni sous la forme du Lemme 2 dans la Section 2.1.

Ce lemme montre que l'application $\mathbb{R} \ni \gamma \mapsto \phi_{k,\gamma}$ est bien définie et C^ω et alors la décomposition $\gamma \mapsto \{\lambda_{1,\gamma}, \dots, \lambda_{N,\gamma}\}$ et $\gamma \mapsto \{\phi_{1,\gamma}, \dots, \phi_{N,\gamma}\}$ correspond à des branches des valeurs propres et des états propres dépendants régulièrement de γ .

A l'aide du Lemme 2, nous pouvons parler à propos des états propres de l'Hamiltonien libre sans aucun problème. Il suffit de prendre un vecteur propre sur une branche de vecteurs propres définie par ce Lemme.

Ainsi, nous allons prendre un état propre de H_0 sur le k 'ième branche et nous le notons par ϕ_k . Le but est d'atteindre $\mathcal{C}_k = \{\phi_k e^{i\theta}; \theta \in \mathbb{R}\}$ via l'approche de la sous-section précédente.

Tous les calculs de la sous-section précédente se généralisent à ce cas, car la dépendance de la fonction de Lyapounov $V(\Psi)$ par rapport à Ψ est toujours régulière.

En fait, comme $\phi_{k,\gamma}$ est une fonction analytique de γ , nous pouvons toujours considérer la dérivée $\frac{d\phi_{k,\gamma}}{d\gamma}$ et de plus, cette dérivée est bornée dans l'intervalle $[0, \gamma^*]$, ce qui implique l'existence d'une fonction $\gamma(\Psi)$ via le Lemme 3. Donc, le Théorème 5 est encore valable pour le cas dégénéré.

2.4.4 Simulations numériques

Nous considérons ici le système à 5 états (2.33), déjà étudié dans la Section 2.3. Comme nous avons vu dans la Section 2.3, ce système est un système contrôlable mais dont la première variation autour de l'état propre $\phi_1 = (1, 0, 0, 0, 0)$ n'est pas contrôlable : les coordonnées $(H_1)_{12}$ et $(H_1)_{13}$ de la matrice de couplage sont des zéros.

Maintenant, nous adaptons le terme de feedback introduit plus haut (2.48) pour ce système. La première partie du champ de contrôle $\gamma(\Psi)$ est définie implicitement par l'équation (2.42). Pour trouver cette fonction en chaque pas de temps, nous utilisons un algorithme de point fixe en calculant d'une façon itérative la valeur de $\theta(V_\gamma)$. La fonction $\theta(s)$ est définie comme étant $\theta(s) = s/2$ et le terme de feedback pour la deuxième partie est donné par (2.48), où la constante positive $c = .02$. Les simulations de la Figure 2.9 montrent l'intérêt de cette approche. Même si $\theta(s) = s/2$ ne satisfait pas la condition (2.44)

du Lemme 3, les simulations numériques montrent que l'algorithme de point fixe utilisé, pour trouver la fonction $\gamma(\Psi)$, converge. Cela est dû au fait que la condition (2.44) est plus forte que la condition nécessaire pour la convergence de l'algorithme de point fixe.

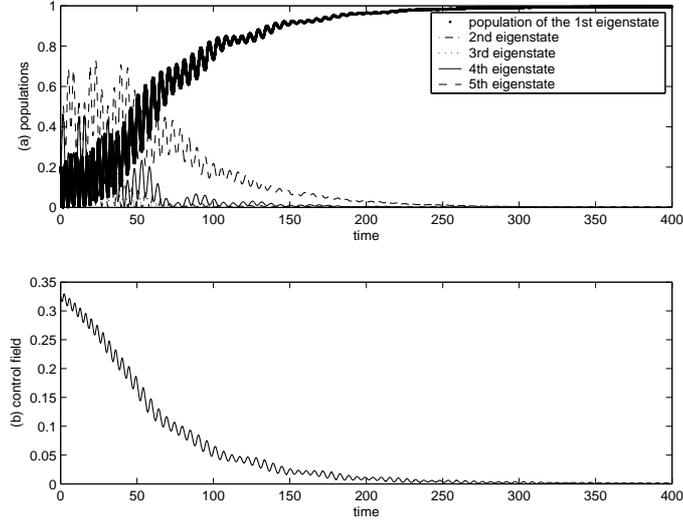


FIG. 2.9 – (a) : les populations de la trajectoire du système $\Psi(t)$ avec le feedback $u(\Psi) = \gamma(\Psi) + v(\Psi)$. Le système atteint complètement $\mathcal{C}_1 = \{e^{i\theta}\phi_1; \theta \in \mathbb{R}\}$; (b) : le champ de contrôle $\gamma(\Psi) + v(\Psi)$.

2.5 Discussions pour le cas de dimension infinie

Les résultats partiels de cette section sont issus d'une collaboration avec K. Beauchard et n'ont pas encore abouti à une preuve rigoureuse de convergence.

Dans les sections précédentes, nous avons étudié le contrôle et la stabilisation de systèmes quantiques de dimension finie. Ces systèmes de dimension finie viennent soit directement d'un modèle physique soit correspondent à une approximation modale d'un système physique de dimension infinie.

Cependant, l'approche Lyapounov introduite dans les sections précédentes, peut être facilement utilisée pour les systèmes dans leur format de dimension infinie.

Comme exemple, regardons un système typique de la chimie quantique. Ce système correspond à un modèle vibrationnel pour la liaison O-H. Nous prenons le système O-H, $H_0 = \frac{-\Delta}{2m} + V$ (m est la masse réduite du système, voir par exemple, [108]), décrit par le potentiel de Morse [108] :

$$V(x) = D_0[e^{-\beta(x-x_0)} - 1]^2 - D_0,$$

avec $D_0 = 0.1994$, $\beta = 1.189$ et $x_0 = 1.821$ (toutes les quantités physiques sont exprimées dans les unités atomiques). Le moment dipolaire de transition est donné par

$$H_1 = \mu(x) = \mu_0 x e^{-x/x^*}$$

avec $\mu_0 = 3.088$ et $x^* = 0.6$. L'objectif du contrôle est de transférer la population sur $\phi = \phi_1$ le premier état excité de H_0 , l'état initial $\Psi(t = 0)$ étant l'état fondamental ϕ_0 . Nous allons reprendre le terme de feedback introduit plus haut

$$u(\Psi) = c \Im(\langle \mu \Psi, \phi \rangle \langle \phi, \Psi \rangle)$$

où c est une constante positive et où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ représente le produit Hermitien dans l'espace fonctionnel $L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C})$. Les simulations de la Figure 2.10 correspondent à $c = 10$ et $T = 9.424 \times 10^4$. Pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps, nous utilisons

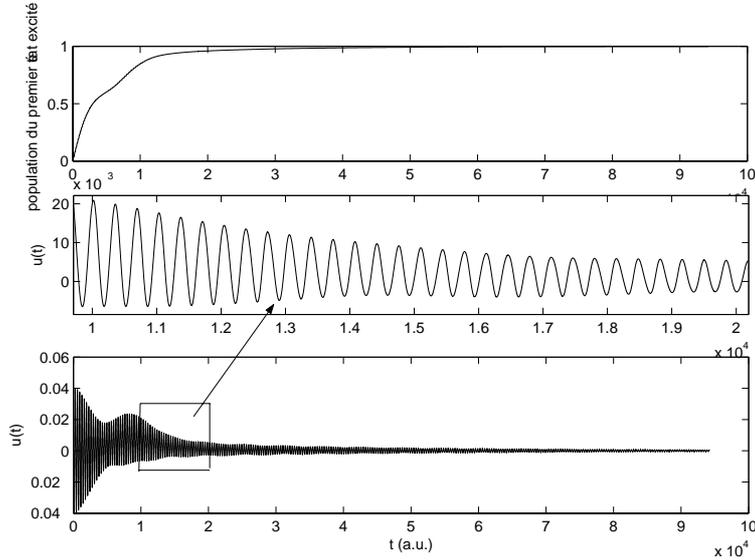


FIG. 2.10 – (a) : Population $|\langle \Psi(t), \phi \rangle|^2$ de $\Psi(t)$ dans l'espace engendré par le premier état excité ϕ_1 de H_0 ; avec l'approche de Lyapounov, on réussit à atteindre complètement l'état cible. (c) : le champ de contrôle $u(t)$ et (b) : un zoom (en temps) sur ce champ.

une approche de split-opérateur de troisième ordre [41]. Schématiquement, nous pouvons présenter cette méthode de la façon suivante : supposons que l'équation à résoudre est de la forme

$$i \frac{d}{dt} \chi(t) = (H_0 + V(t)) \chi(t)$$

où H_0 est l'opérateur d'énergie cinétique et $V(t)$ est le potentiel total (incluant le contrôle). Ainsi, si on note les pas de temps par Δt , la récurrence suivante est utilisée :

$$\chi(t + \Delta t) = e^{-iK\Delta t/2} e^{-iV(t)\Delta t} e^{-iK\Delta t/2} \chi(t)$$

ce qui donne une valeur exacte jusqu'au deuxième ordre pour Δt . Pour appliquer les opérateurs $e^{-iK\Delta t/2}$ et $e^{-iV(t)\Delta t}$, une représentation double **espace réel** \leftrightarrow **Fourier (moments)** a été utilisée. Notez que $V(t)$ est diagonale dans l'espace réel tandis que $K = -\frac{\Delta}{2m}$ est diagonale dans l'espace des moments ; la propagation se fait d'une façon efficace avec la transformation itérative d'un espace à l'autre via la transformation de Fourier rapide.

La simulation performante de la Figure 2.10, nous ramène à essayer de généraliser l'analyse de convergence de la Section 2.1 au cas de dimension infinie. Comme une étude générale pour le cas d'un système arbitraire de dimension infinie est très difficile, voire impossible, nous nous restreignons à l'étude d'un cas test. Nous allons voir que même dans ce cas test, relativement simple, l'étude de convergence via le principe d'invariance de LaSalle nécessite la "pre-compacité" de trajectoires du système : une propriété qui n'est pas facile à démontrer.

Le système que nous considérons ici correspond à une particule chargée non-relativiste (masse $m = 1$, $\hbar = 1$) dans un puits de potentiel de dimension 1 en espace. Ce système quantique est soumis à un champ électrique uniforme, qui constitue le contrôle.

Le système est représenté à l'aide d'une fonction d'onde $\mathbb{R} \ni x \mapsto \Psi(t, x)$ solution de l'équation de Schrödinger

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + (V(x) - u(t)x)\Psi.$$

Nous étudions ce système dans le cas où : $V(x) = 0$ pour $x \in I = (-1/2, 1/2)$ et $V(x) = +\infty$ partout ailleurs. Donc le système s'écrit

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}(t, x) - u(t)x\Psi(t, x), \quad x \in I, \quad (2.54)$$

$$\Psi(0, x) = \Psi_0(x), \quad (2.55)$$

$$\Psi(t, -1/2) = \Psi(t, 1/2) = 0. \quad (2.56)$$

Ce système physique admet un spectre discret et on peut donc très bien parler du problème de stabilisation autour d'un état propre. Nous pouvons même calculer explicitement les vecteurs propres et les valeurs propres de l'Hamiltonien libre :

$$\lambda_k = \frac{k^2\pi^2}{2}, \quad \phi_k = \begin{cases} \cos(k\pi x) & k \text{ impaire} \\ \sin(k\pi x) & k \text{ paire} \end{cases} \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.57)$$

La contrôlabilité de ce système avec contrôles aux bords, a été étudiée pour la première fois par P. Rouchon dans [111]. Il a montré que la première variation de ce système autour de n'importe quel état propre de l'Hamiltonien libre, est non-commandable. Dans un résultat plus récent [15], K. Beauchard a montré que malgré ce résultat de non-trôlabilité de premier ordre, le système non-linéaire est localement contrôlable, autour de ses états propres.

Essayons maintenant d'étudier la stabilisation de ce système autour de son état fondamental

$$\phi = \phi_1 = \cos(\pi x)$$

correspondant à l'énergie $\pi^2/2$. La symétrie dans la géométrie de l'espace fait que l'hypothèse de la proposition (2) du Théorème 1 n'est pas vérifiée : comme les états propres ϕ_k pour les k impairs sont des fonctions impaires d' x nous avons

$$\langle H_1 \phi_k, \phi \rangle = \langle x \phi_k, \phi_1 \rangle = 0 \quad \forall k \text{ impair.}$$

Mais néanmoins, on peut utiliser l'approche de la Section 2.4 pour surmonter cette dégénérescence. Le résultat d'existence du Lemme 3 est encore valable : nous utilisons le théorème de point fixe dans l'espace de Banach associé $C^\infty(L^2; [0, \gamma^*])$.

Ainsi, nous pouvons considérer le terme de feedback

$$u(\Psi) = \gamma(\Psi) + v(\Psi),$$

avec

$$v(\Psi) = c \mathfrak{S}(\langle H_1 \Psi, \phi_{1, \gamma(\Psi)} \rangle \langle \phi_{1, \gamma(\Psi)}, \Psi \rangle),$$

où c est une constante positive. En analogie avec le résultat de la Section 2.4, nous supposons aussi que

$$\| \langle \Psi_0, \phi_{1, \gamma(\Psi_0)} \rangle \| \neq 0.$$

Les simulations numériques pour la stabilisation de ce système montrent le même genre de comportements asymptotiques que dans le cas de dimension finie : nous avons la convergence indépendamment du nombre d'états que nous prenons pour la discrétisation. Essayons de voir en théorie si nous pouvons démontrer un résultat de convergence pour cette équation aux dérivées partielles.

Avant de passer aux arguments nécessaires pour avoir un résultat de convergence, nous devons démontrer que le système non-linéaire de dimension infinie en boucle fermée (2.54), (2.55) et (2.56), est bien posé (existence et unicité de la solution dans l'espace fonctionnel approprié). La démonstration d'un tel résultat d'existence et unicité, se fait à l'aide de deux théorèmes dans le cadre de la théorie des perturbations Lipschitziennes des équations d'évolution linéaires [99] (pages 185-187 théorèmes (1.4) et (1.5)) :

Théorème 6. *Prenons X un espace de Banach et supposons $f(t, \chi) : [0, \infty) \times X \rightarrow X$ une application continue en t pour $t \geq 0$ et localement Lipschitz continue en χ , uniformément en t sur les intervalles bornés. Si $-A$ est un générateur infinitésimal du semi-groupe C_0 $T(t)$ sur X alors pour tout $\chi_0 \in X$, il existe un $t_{\max} \leq \infty$ tel que le problème de Cauchy*

$$\begin{aligned} \frac{d\chi(t)}{dt} + A\chi(t) &= f(t, \chi(t)), \quad t \geq 0 \\ \chi(0) &= \chi_0 \end{aligned} \tag{2.58}$$

admet une solution "mild" χ sur $[0, t_{\max}[$. De plus, si $t_{\max} < \infty$ alors

$$\lim_{t \uparrow t_{\max}} \|\chi(t)\| = \infty.$$

Remarque 4. Pour l'équation du Théorème 6, une solution "mild" sur l'intervalle $[0, T]$ est une fonction $\chi \in C([0, T]; X)$ qui vérifie

$$\chi(t) = T(t)\chi_0 + \int_0^t T(t-s)f(s, \chi(s))ds, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Notez que cette solution n'est pas forcément une solution classique.

Théorème 7. Si la fonction $f : [t_0, t_1] \times X \rightarrow X$ est continûment différentiable de $[t_0, t_1] \times X$ dans X alors la solution "mild" du Théorème 6 avec $\chi_0 \in D(A)$ est une solution classique du problème de Cauchy.

Dans ce contexte, X l'espace de Banach correspond à l'espace fonctionnel $L^2(I; \mathbb{C})$. L'opérateur $A = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ avec les conditions de bords de Dirichlet, génère, bien évidemment, un semi-groupe fortement continu dans l'intervalle compact $[-1/2, 1/2]$. Finalement la perturbation

$$f(t, \Psi) = \gamma(\Psi) + v(\Psi)$$

est même C^∞ par rapport à Ψ : $\gamma \in C^\infty$ découle du Lemme 3, et $v \in C^\infty$ découle de la dépendance analytique des états propres de $H(\gamma)$ par rapport à γ . Ainsi, en appliquant le Théorème 6, il existe un $t_{\max} \leq \infty$ tel que (2.54) avec (2.55) et (2.56), admet une solution "mild" Ψ sur $[0, t_{\max}[$. Montrons maintenant que cette solution est de plus globale : $t_{\max} = \infty$. Si ce n'est pas le cas :

$$t_{\max} < \infty$$

et alors

$$\lim_{t \uparrow t_{\max}} \|\Psi(t_{\max})\|_{L^2} = \infty.$$

Mais cela implique une contradiction car nous savons que dans le domaine de définition de la solution Ψ , sa norme L^2 est conservée :

$$\|\Psi(t)\|_{L^2} = \|\Psi_0\|_{L^2} = 1 \quad \text{pour } 0 \leq t < t_{\max}$$

et alors forcément

$$t_{\max} = \infty.$$

À ce stade, nous pouvons utiliser le Théorème 7 : comme la fonction $\gamma(\Psi) + v(\Psi)$ est même C^∞ et en supposant Ψ_0 suffisamment régulière, la solution "mild" Ψ est en fait une solution classique du système en boucle fermée :

Théorème 8. Le système (2.54) avec les conditions initiales et de bords (2.55) et (2.56), en boucle fermée :

$$u(\Psi) = \gamma(\Psi) + v(\Psi)$$

admet une solution forte, unique et globale.

Essayons maintenant d'étudier le comportement asymptotique de cette solution forte en espérant pouvoir montrer un résultat analogue à celui de la section précédente.

La fonction de Lyapounov $V(\Psi) = 1 - |\langle \Psi, \phi_{1,\gamma(\Psi)} \rangle|^2$ est décroissante et est minorée par 0 : il existe donc $\alpha \geq 0$ tel que :

$$V(\Psi) \searrow \alpha \quad \text{quand} \quad t \rightarrow +\infty.$$

Nous espérons pouvoir montrer que cette constante α est 0. Supposons que ce n'est pas le cas et $\alpha > 0$.

Supposons de plus que :

HC : les trajectoires du système sont pré-compactes, i.e.,

$$\exists \{t_n\}_{n=1}^{\infty} \nearrow +\infty \text{ et } \Psi_{\infty} \in L^2(I; \mathbb{C}) \text{ telle que } \Psi(t_n) \rightarrow \Psi_{\infty} \text{ fortement dans } L^2(I; \mathbb{C}).$$

Pour des arguments sur cette hypothèse, nous renvoyons le lecteur à la fin de cette section.

Comme la fonction $V(\Psi)$ est continue pour la topologie forte de $L^2(I; \mathbb{C})$

$$V(\Psi(t_n)) \rightarrow V(\Psi_{\infty}).$$

et alors $V(\Psi_{\infty}) = \alpha > 0$. Maintenant prenons le système

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Psi} + \gamma(\tilde{\Psi})x\tilde{\Psi} + v(\tilde{\Psi})x\tilde{\Psi} \\ \tilde{\Psi}|_{t=0} &= \Psi_{\infty} \end{aligned} \quad (2.59)$$

et montrons que

$$\exists \tau > 0 \quad V(\tilde{\Psi}(\tau)) < \alpha. \quad (2.60)$$

Nous savons toujours que $\frac{d}{dt}V(\tilde{\Psi}) \leq 0$ et donc si (2.60) n'est pas satisfaite, forcément $V(\tilde{\Psi}) = \alpha$ pour tout $t \geq 0$. Cela implique pour tout $t \geq 0$, que :

$$\gamma(\tilde{\Psi}(t)) = \theta(\alpha) = \text{cte}, \quad v(\tilde{\Psi}(t)) = 0.$$

Ainsi, $\tilde{\Psi}$ vérifie l'équation suivante

$$i \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial t}(t, x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\Psi}}{\partial x^2}(t, x) + \bar{\gamma}x\tilde{\Psi}, \quad (2.61)$$

où nous avons pris $\bar{\gamma} = \theta(\alpha)$ pour simplifier les notations. Il y a deux cas à considérer :

Premier cas : $\bar{\gamma} = \theta(\alpha) = 0$. Cela implique que $\alpha = 0$ et donc il n'y a rien à démontrer.

Deuxième cas : $\bar{\gamma} = \theta(\alpha) \neq 0$. Choissant θ de façon à avoir des variations de plus en plus lentes, nous pouvons supposer $\bar{\gamma}$ aussi petit qu'on veut. La solution $\tilde{\Psi}$ de (2.61) est donnée par

$$\tilde{\Psi}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \langle \Psi_{\infty}, \phi_{k,\bar{\gamma}} \rangle e^{i\lambda_{k,\bar{\gamma}}t} \phi_{k,\bar{\gamma}}.$$

Comme $v(\tilde{\Psi}(t)) = 0$ pour tout $t \geq 0$, nous avons

$$\sum_{k=1}^{\infty} \alpha \langle \Psi_{\infty}, \phi_{k,\bar{\gamma}} \rangle \langle \phi_{1,\bar{\gamma}}, \Psi_{\infty} \rangle e^{i(\lambda_{k,\bar{\gamma}} - \lambda_{1,\bar{\gamma}})t} \langle x\phi_{k,\bar{\gamma}}, \phi_{1,\bar{\gamma}} \rangle = 0 \quad \forall t \geq 0. \quad (2.62)$$

Nous avons $\lambda_{1,0} < \lambda_{2,0} < \dots$, et donc pour $\bar{\gamma}$ suffisamment petit $\lambda_{1,\bar{\gamma}} < \lambda_{2,\bar{\gamma}} < \dots$ est encore valable. Ainsi, les phases $\lambda_{k,\bar{\gamma}} - \lambda_{1,\bar{\gamma}}$ sont toutes positives et distinctes. De plus, il a été démontré dans [15] (Proposition 1) que :

Théorème 9. *Il existe $\gamma_0 > 0$ tel que, pour tout $\gamma \in (0, \gamma_0]$ et pour tout $k \in \{2, 3, \dots\}$*

$$\langle x\phi_{k,\gamma}, \phi_{1,\gamma} \rangle \neq 0.$$

Ainsi, comme les phases $\lambda_{k,\bar{\gamma}} - \lambda_{1,\bar{\gamma}}$ sont deux à deux distinctes, la relation (2.62) implique :

$$\langle \Psi_{\infty}, \phi_{k,\bar{\gamma}} \rangle = 0 \quad \forall k \in \{2, 3, \dots\}. \quad (2.63)$$

En effet les valeurs α et $\langle x\phi_{k,\gamma}, \phi_{1,\gamma} \rangle$ sont non-nulles et de plus $\langle \phi_{1,\bar{\gamma}}, \Psi_{\infty} \rangle \neq 0$ puisqu'à l'instant initial $\| \langle \phi_{1,\gamma(\Psi_0)}, \Psi_0 \rangle \| > 0$.

Les équations (2.63) impliquent (conservation de la norme L^2)

$$\| \langle \Psi_{\infty}, \phi_{1,\bar{\gamma}} \rangle \| = 1,$$

ce qui est équivalent à

$$\alpha = \theta(V(\Psi_{\infty})) = \theta(1 - \| \langle \Psi_{\infty}, \phi_{1,\bar{\gamma}} \rangle \|^2) = 0.$$

Donc, nous avons démontré qu'il existe $\tau > 0$ tel que

$$V(\tilde{\Psi}(\tau)) < \alpha.$$

Définissons maintenant les fonctions $\Psi_n(t, x)$, solutions de :

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi_n}{\partial x^2} + \gamma(\Psi_n)x\Psi_n + v(\Psi_n)x\Psi_n, \\ \Psi_n(0, x) &= \Psi(t_n, x). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Bien évidemment, nous avons

$$\Psi(t_n + s, x) = \Psi_n(s, x), \quad \forall s > 0 \quad \forall x.$$

Nous allons montrer que :

$$\Psi_n(\tau, \cdot) \rightarrow \tilde{\Psi}(\tau, \cdot) \quad \text{fortement dans } L^2(I; \mathbb{C}). \quad (2.65)$$

Ainsi $V(\Psi(t_n + \tau)) = V(\Psi_n(\tau)) \rightarrow V(\tilde{\Psi}(\tau)) < \alpha$, qui est en contradiction avec $V(\Psi(t)) \rightarrow \alpha$ lorsque $t \rightarrow \infty$.

Pour démontrer (2.65), nous considérons les dynamiques (2.59) et (2.64). Un calcul simple montre que comme les fonctions $v(\Psi_n)$, $\gamma(\Psi_n)$, $v(\tilde{\Psi})$ et $\gamma(\tilde{\Psi})$ restent bornées, nous avons

$$\|\Psi_n(\tau) - \tilde{\Psi}(\tau)\|_{L^2(I;\mathbb{C})} \leq C \|\Psi_n(0) - \tilde{\Psi}(0)\|_{L^2(I;\mathbb{C})} = C \|\Psi(t_n) - \Psi_\infty\|_{L^2(I;\mathbb{C})},$$

où C est une constante positive qui dépend seulement de τ et des bornes de v et de γ . Comme $\|\Psi(t_n) - \Psi_\infty\|$ tend vers 0 par définition, la preuve de (2.65) est terminée.

Nous avons donc montré qu'on peut attendre le même genre de résultat de convergence que dans la Section 2.4 pour un système de dimension infinie sous réserve que l'hypothèse de pré-compacité **HC** soit satisfaite. Les simulations montrent qu'au moins pour le système de cette section cette hypothèse semble être satisfaite. Une démonstration rigoureuse de celle-ci manquant encore, elle fait l'objet d'un travail en progrès.

Chapitre 3

Identification de l'Hamiltonien

Beaucoup de procédures appliquées pour la génération de trajectoires, utilisent la possibilité d'effectuer un grand nombre d'expériences dans un petit intervalle du temps. Donc la sortie de ces expériences peut être utilisée pour corriger la procédure et identifier des champs de contrôle plus satisfaisants [101, 80].

La possibilité de générer rapidement une grande quantité de données peut être aussi utilisée pour extraire plus d'information sur les paramètres inconnus du système. Pour un choix arbitraire du contrôle, nous pouvons effectuer plusieurs observations et en déduire des informations sur le système. Cette procédure peut être effectuée à une vitesse beaucoup plus élevée que celle des simulations numériques. De plus les progrès récents dans la technologie du laser nous permettent de générer une classe très large de stimulations. Le problème inverse, appelé *l'identification de l'Hamiltonien* a été formulé comme un problème d'optimisation et pour différentes configurations [124, 115, 68, 46].

Cependant, à ce jour, peu de résultats théoriques permettent de mettre en évidence la relation entre la mesure et la qualité d'inversion [136, 2, 13]. Pour remédier à cette situation, nous introduisons dans ce chapitre une formalisation du problème ci-dessus. Ensuite nous montrons que le problème mathématique d'inversion est bien posé. Nous fournissons aussi une illustration numérique dans le cas simple d'un système à 4 états [77].

Considérons un système quantique

$$i \frac{d}{dt} \Psi = (H_0 + V + \epsilon(t)\mu)\Psi, \quad \Psi|_{t=0} = \Psi_0, \quad (3.1)$$

où H_0 est l'opérateur d'énergie cinétique, V est l'opérateur de potentiel et μ est le moment dipolaire couplant le système à un champ de laser externe $\epsilon(t)$. Nous supposons que ce système est convenablement décrit comme un système de dimension finie : H_0 , V et μ sont des matrices Hermitiennes $N \times N$ avec des coefficients dans \mathbb{C} et $\Psi(t) \in \mathbb{C}^N$. Notons par $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ les vecteurs propres de $H_0 + V$ et par $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$ les valeurs propres associées. De plus, dans ce chapitre $H = H_0 + V$ désigne l'Hamiltonien du système en absence du laser.

On suppose les matrices H et μ inconnues ou partiellement connues, et on se fixe pour but dans ce chapitre de les identifier à partir des observations effectuées en laboratoire.

Le problème semble être sous-déterminé lorsque le champ de contrôle, $\epsilon(t)$, est fixé. Il s'agit de trouver des champs $\epsilon(t)$ qui sont suffisamment excitants pour retirer le plus d'informations possibles. Deux configurations différentes (dépendantes des paramètres inconnus et de la nature de l'information) sont considérées pour ce problème inverse :

- (S1)** L'Hamiltonien H est connu et le but est d'identifier le moment dipolaire μ . On mesure pour tout temps $t \geq 0$, les populations de différents états propres ϕ_i , i.e. $p_i(t) = |\langle \phi_i, \Psi(t) \rangle|^2$, $i = 1, 2, \dots$. Cela est accompli avec autant de champ de contrôle $\epsilon(t)$ qu'on en a besoin.
- (S2)** Ni le potentiel V ni le moment dipolaire μ ne sont connus et le but est de les identifier. L'identification de l'Hamiltonien H est équivalente à l'identification du potentiel V car l'opérateur H_0 est déjà connu. Les valeurs propres de $H = H_0 + V$ sont supposées connues (cette hypothèse est réaliste en pratique, voir la Remarque 11). Ici, nous mesurons les population p_i des états de la base canonique de H_0 , $\{e_i\}_{i=1}^N$: $p_i(t) = |\langle e_i, \Psi(t) \rangle|^2$, $i = 1, 2, \dots$ pour tout temps $t > 0$ et pour tout champ de contrôle $\epsilon(t)$.

Deux questions fondamentales au sujet du traitement mathématique de ces problèmes se posent alors : l'existence et l'unicité d'un moment dipolaire (et/ou d'un Hamiltonien) compatible(s) avec les mesures données. En plus, ces questions peuvent être formulées dans une configuration de dimension infinie ou bien dans une configuration de dimension finie comme ci-dessus. Notons qu'en général, l'Hamiltonien interne est de dimension infinie, et qu'ici nous avons par troncature une approximation de dimension finie. On peut aussi considérer d'autres mesures que celle des populations. L'ensemble des mesures que l'on peut choisir est l'ensemble des valeurs moyennes d'observables physiques $\{\hat{O}_i\}$ (ici \hat{O}_i sont des matrices Hermitiennes à coefficients dans \mathbb{C}).

Nous considérons seulement le problème d'unicité dans les deux configurations **S1** et **S2**. Cela fait l'objet de la Section 3.1. Nous n'étudions pas la question d'existence et nous supposons que les mesures proviennent d'un système physique existant. De plus, le modèle bi-linéaire (3.1) est supposé exact pour ce système physique (sauf que V et μ peuvent être inconnus). Ensuite, nous passons au problème pratique qui consiste à trouver un algorithme pour extraire le plus d'information possible à partir de la mesure. Dans la Section 3.2, nous proposons un algorithme numérique similaire à la méthode de [46]. Nous testons sa performance sur un système à 4 états. Cet algorithme a été développé selon l'idée principale suite aux discussions entre C. Le Bris, H. Rabitz et G. Turinici.

Nous supposons dans ce chapitre que les hypothèses suivantes sont satisfaites :

- A1** L'équation (3.1) est contrôlable [109].
- A2** Les transitions de l'Hamiltonien H sont non-dégénérées : $\lambda_{i_1} - \lambda_{j_1} \neq \lambda_{i_2} - \lambda_{j_2}$ pour $(i_1, j_1) \neq (i_2, j_2)$ [130].
- A3** La partie diagonale du moment dipolaire μ , écrit dans la base propre de l'Hamiltonien H , vaut zéro : $\langle \phi_i | \mu | \phi_i \rangle = 0$, $i = 1, \dots, N$.

Quelques commentaires concernant ces hypothèses :

Sous une hypothèse adéquate [109], on sait que la notion de contrôlabilité implique l'existence d'un temps T_0 tel que pour tout temps $T > T_0$ et pour toute paire d'états initial et cible sur la sphère unité de l'espace d'état, il existe un champ de contrôle $\epsilon(t)$ constant par morceaux qui amène le système (à partir de l'état initial) sur l'état cible en un temps T .

L'hypothèse **(A2)** est pertinente pour la contrôlabilité locale [130] et entraîne la contrôlabilité globale du système si l'on rajoute comme hypothèse que le graphe associé au moment dipolaire μ [130] est connexe (le système n'est pas décomposable en sous-systèmes indépendants).

L'hypothèse **(A3)** est nécessaire pour empêcher une ambiguïté systématique dans la procédure d'identification. Changer le moment dipolaire μ en $\mu + D$, où D est une matrice diagonale (dans la base propre de H) ne change pas les populations observées. Dans ce cas, l'état $\Psi(t)$ est remplacé par $\exp(-iD \int_0^t \epsilon(s) ds) \Psi(t)$.

Remarque 5. *En laboratoire, le bruit dans les données est un facteur non-négligeable. Dans la formulation du problème inverse ci-dessus nous ne considérons pas explicitement de modèle pour le bruit. Des facteurs de tolérance sont introduits (voir Section 3.2) qui peuvent être vus comme une méthode numérique pour traiter ces bruits. Ainsi, cette étude doit être considérée comme une première étape pour de futurs travaux qui prendront en compte ces bruits.*

Les résultats présentés dans ce chapitre font l'objet d'une publication en cours, soumise à la revue "ESAIM : Control, Optimization and Calculus of Variations" [77].

3.1 Unicité

3.1.1 S1 : Hamiltonien connu et moment dipolaire inconnu

Pour établir la nature bien posée du problème, il est nécessaire de démontrer qu'il existe au plus un moment dipolaire μ compatible avec les mesures. On ne peut pas empêcher quelques degrés d'indétermination dans le cas où le système admet certaines symétries. Mais à part ce cas là, l'unicité est satisfaite comme le mentionne le Théorème 10, ci-dessous. L'Hamiltonien H est connu et on peut le diagonaliser dans sa base propre avec les coefficients $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$. Le résultat principal de cette sous-section est le :

Théorème 10. *Supposons qu'il existe deux moments dipolaires μ_1 et μ_2 , et donc deux*

fonctions d'onde Ψ_1 et Ψ_2 évoluant selon

$$i \frac{d}{dt} \Psi_1 = (H + \epsilon(t)\mu_1)\Psi_1, \quad (3.2)$$

$$i \frac{d}{dt} \Psi_2 = (H + \epsilon(t)\mu_2)\Psi_2, \quad (3.3)$$

qui produisent des observations identiques pour tout temps $t \in [0, \infty)$ et tout champ $\epsilon(t)$:

$$|\langle \Psi_1(t), \phi_i \rangle|^2 = |\langle \Psi_2(t), \phi_i \rangle|^2 \quad i = 1, \dots, N. \quad (3.4)$$

Alors sous les hypothèses **(A1)**, **(A2)** et **(A3)**, les deux moments dipolaires sont égaux à des facteurs de phase près, $\{\alpha_i\}_{i=1}^N \subset \mathbb{R}$ tels que :

$$\forall i, j = 1, \dots, N, \quad (\mu_1)_{ij} = e^{i(\alpha_i - \alpha_j)} (\mu_2)_{ij}. \quad (3.5)$$

Cette incertitude quant aux phases relatives des éléments de la matrice dipole est due à l'invariance de l'Hamiltonien H et des populations $p_i(t) = |\langle \Psi(t), \phi \rangle|^2$ par toute transformation unitaire diagonale U :

$$U = \text{diag}(e^{i\alpha_1}, e^{i\alpha_2}, \dots, e^{i\alpha_N}).$$

Nous donnons un exemple ci-dessous.

Exemple 1. Considérons deux systèmes admettant le même Hamiltonien H :

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix},$$

et deux moments dipolaires différents μ_- et μ_+ :

$$\mu_- = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha & 0 \\ -\alpha & 0 & \beta \\ 0 & \beta & 0 \end{pmatrix} \quad \mu_+ = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ \alpha & 0 & \beta \\ 0 & \beta & 0 \end{pmatrix}.$$

Ces deux systèmes peuvent être respectivement écrits sous la forme

$$(\Sigma) \begin{cases} i \frac{d}{dt} \Psi_1 &= E_1 \Psi_1 - \alpha \epsilon(t) \Psi_2 \\ i \frac{d}{dt} \Psi_2 &= E_2 \Psi_2 - \alpha \epsilon(t) \Psi_1 + \beta \epsilon(t) \Psi_3 \\ i \frac{d}{dt} \Psi_3 &= E_3 \Psi_3 + \beta \epsilon(t) \Psi_2 \end{cases}$$

et

$$(\Sigma') \begin{cases} i \frac{d}{dt} \tilde{\Psi}_1 &= E_1 \tilde{\Psi}_1 + \alpha \epsilon(t) \tilde{\Psi}_2 \\ i \frac{d}{dt} \tilde{\Psi}_2 &= E_2 \tilde{\Psi}_2 + \alpha \epsilon(t) \tilde{\Psi}_1 + \beta \epsilon(t) \tilde{\Psi}_3 \\ i \frac{d}{dt} \tilde{\Psi}_3 &= E_3 \tilde{\Psi}_3 + \beta \epsilon(t) \tilde{\Psi}_2 \end{cases}$$

Notons par $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3)$ la solution du système (Σ) . Alors $\tilde{\Psi} = (\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tilde{\Psi}_3) = (\Psi_1, -\Psi_2, -\Psi_3)$ est la solution de (Σ') . Donc, les fonctions d'onde Ψ et $\tilde{\Psi}$ aboutissent à l'observation de populations identiques pour tout champ de contrôle $\epsilon(t)$ et tout moment $t > 0$ (3.4). Ainsi les deux moments dipolaires sont des solutions au problème d'inversion.

Démonstration du Théorème 10 :

En dérivant (3.4) par rapport au temps t , nous avons :

$$\epsilon(t)\Im(\langle \mu_1 \Psi_1(t), \phi_i \rangle \langle \phi_i, \Psi_1(t) \rangle) = \epsilon(t)\Im(\langle \mu_2 \Psi_2(t), \phi_i \rangle \langle \phi_i, \Psi_2(t) \rangle). \quad (3.6)$$

De cette équation, nous déduisons

$$\Im(\langle \mu_1 \Psi_1(t), \phi_i \rangle \langle \phi_i, \Psi_1(t) \rangle) = \Im(\langle \mu_2 \Psi_2(t), \phi_i \rangle \langle \phi_i, \Psi_2(t) \rangle) \quad \forall i = 1, 2, \dots \quad (3.7)$$

Si pour un certain temps t , (3.7) ne peut pas être déduite de (3.6) ($\epsilon(t) = 0$), nous pouvons continûment étendre le champ de contrôle sur $(t, +\infty)$ afin que pour $s > 0$, $\epsilon(t+s) \neq 0$ (sans changer la solution de l'équation de Schrödinger sur l'intervalle $[0, t]$). Comme (3.6) est satisfaite pour tous les choix de $\epsilon(t)$ et comme $\epsilon(t+s) \neq 0$ pour $s > 0$, la relation (3.7) est valable pour $t+s$ avec $s > 0$. Maintenant par continuité et en passant à la limite lorsque s tend vers 0, l'équation (3.7) est valable aussi pour t . Une illustration de cette procédure est présentée dans la Figure 3.1. Comme (3.2) est supposé contrôlable, il existe

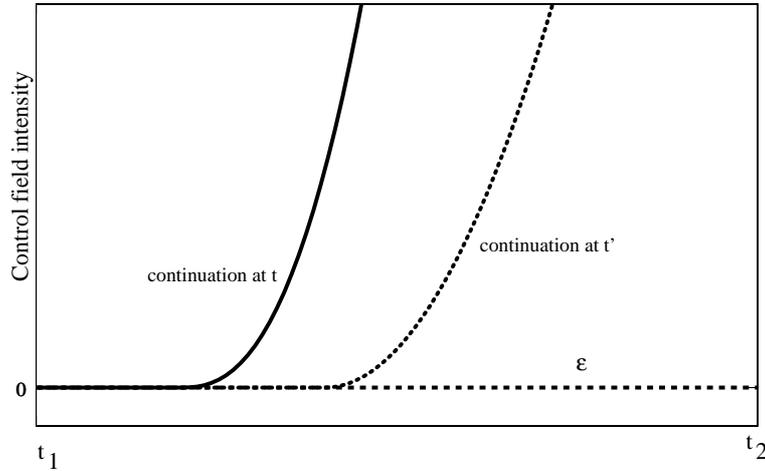


FIG. 3.1 – L'illustration de l'implication $(3.6) \Rightarrow (3.7)$. Le champ $\epsilon(t)$ de (3.6) est supposé être nul $\epsilon \equiv 0$ entre t_1 et t_2 . Pour obtenir l'équation (3.7), nous construisons pour chaque temps (par exemple, t et t') un prolongement non-trivial.

un contrôle $\epsilon(t)$ (défini sur $[0, T]$) qui amène le système à partir de l'état initial Ψ_0 à l'état

$$\Psi_1(T) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \phi_j. \quad (3.8)$$

Notons que comme le système est contrôlable, tout état final est accessible, et la forme (3.8) est choisie pour sa commodité.

Avec l'équation (3.4) pour $t = T$, on a

$$\exists(\alpha_1, \dots, \alpha_N) \in \mathbb{R}^N \quad \text{tel que} \quad \Psi_2(T) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{i\alpha_j} \phi_j.$$

En évaluant (3.7) à l'instant $t = T$ et à l'aide de $(\mu_1)_{ii} = (\mu_2)_{ii} = 0$, on a :

$$\sum_{j \neq i} \Im(\langle \mu_1 \phi_j, \phi_i \rangle) = \sum_{j \neq i} \Im(e^{i(\alpha_j - \alpha_i)} \langle \mu_2 \phi_j, \phi_i \rangle).$$

Une fois que le système (3.2) (resp. le système (3.3)) est dans l'état $\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \phi_j$ (resp. $\Psi_2(T) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{i\alpha_j} \phi_j$), nous choisissons le terme de contrôle $\epsilon(T + s)$ nul pour $s > 0$.

Via des arguments similaires aux précédents (Figure 3.1), l'équation (3.7) est encore valable :

$$\sum_{j \neq i} \Im(e^{i\omega_{ij}s} \langle \mu_1 \phi_j, \phi_i \rangle) = \sum_{j \neq i} \Im(e^{i\omega_{ij}s} e^{i(\alpha_j - \alpha_i)} \langle \mu_2 \phi_j, \phi_i \rangle)$$

où $\omega_{ij} = \lambda_j - \lambda_i$. Appelons θ_{ij}^1 et θ_{ij}^2 , les phases respectives de $\langle \mu_1 \phi_j, \phi_i \rangle$ et $\langle \mu_2 \phi_j, \phi_i \rangle$.¹

On a donc, pour tout $s > 0$,

$$\sum_{j \neq i} \sin(\omega_{ij}s + \theta_{ij}^1) |\langle \mu_1 \phi_j, \phi_i \rangle| = \sum_{j \neq i} \sin(\omega_{ij}s + \alpha_j - \alpha_i + \theta_{ij}^2) |\langle \mu_2 \phi_j, \phi_i \rangle|. \quad (3.9)$$

L'hypothèse de non-dégénérescence **(A2)** implique alors que

$$|\langle \mu_1 \phi_j, \phi_i \rangle| = |\langle \mu_2 \phi_j, \phi_i \rangle|,$$

ce qui se traduit par le fait que les coefficients (ij) des moments dipolaires μ_1 et μ_2 coïncident à un facteur de phase près

$$\forall i, j, \quad \text{il existe } \theta_{ij} \text{ telle que } (\mu_2)_{ij} = e^{i\theta_{ij}} (\mu_1)_{ij}$$

où $\theta_{ij} = \theta_{ij}^2 - \theta_{ij}^1$. En plus, l'équation (3.9) implique que

$$\sin(\omega_{ij}s + \theta_{ij}^1) = \sin(\omega_{ij}s + \theta_{ij}^2 + \alpha_j - \alpha_i) \quad \forall i, j = 1, \dots, N \quad \text{et} \quad \forall s > 0. \quad (3.10)$$

Finalement l'équation (3.10), entraîne que

$$e^{i\theta_{ij}} = e^{i(\theta_{ij}^2 - \theta_{ij}^1)} = e^{i(\alpha_i - \alpha_j)}$$

ce qui termine la preuve du théorème.

¹ Nous définissons la phase d'un nombre complexe $re^{i\phi}$ avec $r > 0$ et $\phi \in [0, 2\pi)$ comme son angle ϕ .

Remarque 6. *D'après la preuve précédente, on voit que le temps dynamique nécessaire au processus d'inversion est formellement du même ordre de grandeur que le plus petit temps de contrôle du système. Toutefois, on voit que la preuve marche de la même façon, si on choisit un autre état $\Psi_1(T)$ dans (3.8), sous réserve que toutes les populations de tous les niveaux soient non-nulles. Il a été montré dans [131] (Lemme 2), que sous les hypothèses ci-dessus le temps T nécessaire pour atteindre au moins un tel état peut être supposé aussi petit qu'on veut. Si nous négligeons toutes les considérations pratiques cela veut dire que le temps requis pour le processus d'inversion peut être arbitrairement petit.*

3.1.2 S2 : l'Hamiltonien et le moment dipolaire inconnus

Cette sous-section est consacrée au résultat principal suivant :

Théorème 11. *Supposons qu'il existe deux Hamiltoniens H_1 et H_2 et deux moments dipolaires μ_1 et μ_2 , et donc deux fonctions d'onde Ψ_1 et Ψ_2 évoluant selon*

$$i \frac{d}{dt} \Psi_1 = (H_1 + \epsilon(t)\mu_1)\Psi_1, \quad (3.11)$$

$$i \frac{d}{dt} \Psi_2 = (H_2 + \epsilon(t)\mu_2)\Psi_2, \quad (3.12)$$

qui entraînent des observations identiques pour tout temps $t \in [0, \infty)$ et tout champ $\epsilon(t)$

$$|\langle \Psi_1(t), e_i \rangle|^2 = |\langle \Psi_2(t), e_i \rangle|^2 \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.13)$$

où $\{e_i\}_{i=1}^N$ est une base canonique de l'espace d'état \mathbb{C}^N . Supposons les hypothèses **(A1)**, **(A2)** et **(A3)** pour les deux Hamiltoniens H_1 et H_2 (voir les remarques 7 et 8 ci-dessous) et ajoutons de plus la condition suivante :

(A4) *Les Hamiltoniens H_1 et H_2 admettent les mêmes valeurs propres.*

Supposons aussi (voir la remarque 12 ci-dessous), que

(A5) *Il n'existe pas de sous-espace de dimension un ou deux engendré par les vecteurs $\{e_i\}$, qui reste invariant durant l'évolution libre ($\epsilon \equiv 0$) du premier système (H_1 et μ_1).*

Alors, il existe un ensemble de phases $\{\alpha_i\}_{i=1}^N$ tel que, pour tout $1 \leq i, j \leq N$,

$$(\mu_1)_{ij} = e^{i(\alpha_i - \alpha_j)} (\mu_2)_{ij}, \quad (3.14)$$

$$(H_1)_{ij} = e^{i(\alpha_i - \alpha_j)} (H_2)_{ij}. \quad (3.15)$$

Voici, quelques remarques à propos de ce résultat :

Remarque 7. *Les hypothèses **(A1)** et **(A2)** pour H_1 , conjointement avec **(A4)** et (3.13) pour H_1 et H_2 , impliquent que **(A1)** tient aussi pour H_2 .*

Remarque 8. *L'hypothèse (A2) pour un des Hamiltoniens, conjointement avec (A4), établit (A2) pour l'autre Hamiltonien.*

Remarque 9. *De façon similaire à la Sous-section 3.1.1, l'incertitude dans les phases relatives des éléments de la matrice est due à une transformation unitaire diagonale U :*

$$U = \text{diag}(e^{i\alpha_1}, e^{i\alpha_2}, \dots, e^{i\alpha_N})$$

ce qui ne change pas les populations.

Remarque 10. *Notez que, par contraste avec la configuration du Théorème 10, les observations ici portent sur les populations le long d'une base canonique (3.13). En fait, à priori les populations des états propres de H ne sont pas accessibles car l'Hamiltonien H n'est pas connu. Cependant, même si ces populations étaient accessibles, leur connaissance n'aurait pas permis l'identification de H et de μ . Une telle configuration est similaire à celle de la sous-section 3.1.1, et H et μ peuvent être identifiés seulement à une transformation unitaire de la base propre de H près.*

Remarque 11. *L'hypothèse (A4) est physiquement pertinente, car les méthodes classiques de spectroscopie permettent d'identifier les valeurs propres de l'Hamiltonien H . En fait, la spectroscopie donne seulement les différences entre les valeurs propres et ne donne pas les valeurs absolues. Ce facteur additionnel inconnu ne sera pas vu par les mesures et n'a aucun impact sur le résultat d'identification.*

Remarque 12. *L'hypothèse (A5) est considérée pour sa simplicité. Le Théorème 12 affaiblit cette hypothèse et montre que la seule hypothèse nécessaire, remplaçant (A5), est que le système doit être de dimension supérieure à 2.*

Remarque 13. *Comme il sera clair dans la preuve ci-dessous, nous pouvons remplacer la base canonique $\{e_i\}_{i=1}^N$ par n'importe quelle base fixée, indépendante du système.*

Démonstration du Théorème 11 :

En dérivant l'équation (3.13) par rapport au temps, nous avons :

$$\begin{aligned} \Im(\langle H_1 \Psi_1, e_i \rangle \langle e_i, \Psi_1 \rangle) + \epsilon(t) \Im(\langle \mu_1 \Psi_1, e_i \rangle \langle e_i, \Psi_1 \rangle) = \\ \Im(\langle H_2 \Psi_2, e_i \rangle \langle e_i, \Psi_2 \rangle) + \epsilon(t) \Im(\langle \mu_2 \Psi_2, e_i \rangle \langle e_i, \Psi_2 \rangle). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Considérons une base propre $(\phi_i^1)_{i=1}^N$ de H_1 et $(\phi_i^2)_{i=1}^N$ une base propre de H_2 . Tous les vecteurs e_j peuvent être décomposés dans les deux bases :

$$e_j = \sum c_{j,i}^1 \phi_i^1 = \sum c_{j,i}^2 \phi_i^2 \quad \forall j \in \{1, \dots, N\}.$$

Les deux matrices c^1 et c^2 sont unitaires. La preuve est divisée en trois étapes. Dans la première étape, nous démontrons l'égalité $|c_{i,j}^1| = |c_{i,j}^2|$ pour $i, j = 1, \dots, N$. Dans la

deuxième étape, nous montrons que les phases satisfont une relation spéciale qui implique (3.15). La troisième étape conclut la démonstration en analysant le moment dipolaire et montre l'équation (3.14).

Étape 1 :

Comme le système physique est supposé contrôlable, nous pouvons choisir le champ $\epsilon(t)$ pour avoir $\Psi_1(T) = e_1$ et $\epsilon(T) = 0$.²

À l'aide de (3.13), nous avons $\Psi_2(T) = e^{i\theta} e_1$ pour un certain terme de phase θ . Ensuite, laissons le système évoluer librement après le temps T avec le contrôle $\epsilon(T + s) = 0$ pour $s > 0$. Alors

$$\Psi_1(T + s) = \sum c_{1,i}^1 e^{-is\lambda_i} \phi_i^1, \quad \Psi_2(T + s) = \sum c_{1,i}^2 e^{-is\lambda_i + i\theta} \phi_i^2. \quad (3.17)$$

L'équation (3.16) conjointement avec $\epsilon(T + s) = 0$ pour $s \geq 0$, implique

$$\Im(\langle H_1 \Psi_1(T + s), e_1 \rangle \langle e_1, \Psi_1(T + s) \rangle) = \Im(\langle H_2 \Psi_2(T + s), e_1 \rangle \langle e_1, \Psi_2(T + s) \rangle) \quad s \geq 0. \quad (3.18)$$

En outre,

$$\begin{aligned} & \langle H_1 \Psi_1(T + s), e_1 \rangle \langle e_1, \Psi_1(T + s) \rangle \\ &= \left\langle \sum \lambda_i c_{1,i}^1 e^{-i\lambda_i s} \phi_i^1, \sum c_{1,i}^1 \phi_i^1 \right\rangle \left\langle \sum c_{1,i}^1 \phi_i^1, \sum c_{1,i}^1 e^{-i\lambda_i s} \phi_i^1 \right\rangle \\ &= \left(\sum_i \lambda_i |c_{1,i}^1|^2 e^{-i\lambda_i s} \right) \left(\sum_j |c_{1,j}^1|^2 e^{i\lambda_j s} \right) \\ &= \sum_{i,j} \lambda_i |c_{1,i}^1|^2 |c_{1,j}^1|^2 e^{i\omega_{ij}s}, \quad (\text{notons que } \omega_{ij} = \lambda_j - \lambda_i) \\ &= \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N (\lambda_i e^{i\omega_{ij}s} + \lambda_j e^{-i\omega_{ij}s}) |c_{1,i}^1|^2 |c_{1,j}^1|^2 + \sum_{i=1}^N \lambda_i |c_{1,i}^1|^4. \end{aligned}$$

Comme les mêmes calculs tiennent pour H_2 et Ψ_2 , l'équation (3.18) implique que

$$\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N |c_{1,i}^1|^2 |c_{1,j}^1|^2 (\omega_{ij} \sin(\omega_{ij}s)) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N |c_{1,i}^2|^2 |c_{1,j}^2|^2 (\omega_{ij} \sin(\omega_{ij}s)).$$

Ainsi, avec l'hypothèse **(A2)**, nous avons

$$|c_{1,i}^1| |c_{1,j}^1| = |c_{1,i}^2| |c_{1,j}^2| \quad \forall i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (3.19)$$

Considérons maintenant la première ligne de la matrice c^1 . Il y a trois cas à considérer :

² Lorsqu'un système réversible en temps est contrôlable, il est toujours possible, pour tout couple d'états Ψ_1 et Ψ_2 , de trouver un contrôle $\epsilon_{1,2}$ qui amène le système sur Ψ_2 à partir de l'état initial Ψ_1 et qui est nul à l'instant final : $\epsilon_{1,2}(T) = 0$. Par exemple, en propageant Ψ_2 de façon rétrograde en temps pour arriver sur un certain état Ψ_3 à l'instant $T - \eta$, $\eta > 0$, par l'évolution libre, nous pouvons conduire le système à partir de Ψ_1 sur l'état Ψ_3 avec un bon choix du champ de contrôle et ensuite nous laissons Ψ_3 évoluer librement pour atteindre Ψ_2 .

1. il y a plus que deux coefficients non-nuls ;
2. il y a exactement deux coefficients non-nuls ;
3. il y a un seul coefficient non-nul.

Dans le cas (1), nous notons par $c_{1,i}^1$, $c_{1,j}^2$ et $c_{1,k}^1$ trois coefficients non-nuls. À l'aide de l'équation (3.19) pour ces trois termes, nous avons,

$$|c_{1,i}^1| |c_{1,j}^1| = |c_{1,i}^2| |c_{1,j}^2|, \quad |c_{1,i}^1| |c_{1,k}^1| = |c_{1,i}^2| |c_{1,k}^2|, \quad |c_{1,j}^1| |c_{1,k}^1| = |c_{1,j}^2| |c_{1,k}^2|$$

ce qui implique :

$$|c_{1,i}^1| = |c_{1,i}^2|. \quad (3.20)$$

On peut employer le même argument pour tous les coefficients non-nuls de la matrice.

Dans le cas (2), $c_{1,i}^1$ et $c_{1,j}^1$ sont les deux coefficients non-nuls. Dans la i 'ième colonne de la matrice c^1 , il y a forcément un coefficient non-nul $c_{k,i}^1$ différent de $c_{1,i}^1$. Nous avons $|c_{1,i}^1| < 1$ et la norme de la colonne i est 1, car c^1 est une matrice unitaire.

Considérons maintenant la k 'ième ligne. Comme la matrice c^1 est unitaire, nous avons

$$c_{1,i}^1 c_{k,i}^{1*} + c_{1,j}^1 c_{k,j}^{1*} = 0.$$

Comme les termes $c_{1,i}^1$, $c_{1,j}^1$ et $c_{k,i}^1$ sont non-nuls, le coefficient $c_{k,j}^1$ doit être non-nul aussi. Donc dans la k 'ième ligne, nous avons au moins deux coefficients non-nuls $c_{k,i}^1$ et $c_{k,j}^1$. À l'aide de **(A5)**, nous savons qu'il y a au moins trois coefficients non-nuls dans cette ligne. Sinon, le sous-espace de dimension 2 généré par $\{e_1, e_k\}$ aurait coïncidé avec l'espace propre engendré par $\{\phi_i^1, \phi_j^1\}$. En utilisant l'argument du cas 1 pour la k 'ième ligne on a,

$$|c_{k,l}^1| = |c_{k,l}^2| \quad \forall l = 1, \dots, N.$$

Ainsi, il existe des phases θ_i et θ_j telles que :

$$c_{k,i}^2 = e^{i\theta_i} c_{k,i}^1, \quad c_{k,j}^2 = e^{i\theta_j} c_{k,j}^1.$$

Comme les deux matrices c^1 et c^2 sont unitaires

$$c_{1,i}^1 c_{k,i}^{1*} + c_{1,j}^1 c_{k,j}^{1*} = 0, \quad c_{1,i}^2 c_{k,i}^{2*} e^{-i\theta_i} + c_{1,j}^2 c_{k,j}^{2*} e^{-i\theta_j} = 0,$$

et alors

$$|c_{1,i}^1| = |c_{1,i}^2|, \quad |c_{1,j}^1| = |c_{1,j}^2|.$$

Finalement, nous montrons que le cas (3) ne se présente jamais. Notons par $c_{1,i}^1$ le seul élément non-nul de la première ligne. Comme la matrice c^1 est unitaire, nous avons $|c_{1,i}^1| = 1$, donc $e_1 = e^{i\theta_i} \phi_i^1$ pour un certain terme de phase θ_i . Mais l'hypothèse **(A5)** du théorème interdit cette situation : le sous-espace de dimension 1 engendré par e_1 coïncide avec l'espace propre engendré par ϕ_i^1 .

Dans les deux cas (1) et (2), nous avons montré que les coefficients de la première ligne coïncident en module

$$|c_{1,i}^1| = |c_{1,i}|^2,$$

pour tous les indices i . Les mêmes calculs peuvent être faits pour toutes les autres lignes de la matrice et donc il existe un ensemble de phases $\{\theta_{ij}; i, j = 1, \dots, N\}$, tel que

$$c_{i,j}^2 = e^{i\theta_{ij}} c_{i,j}^1. \quad (3.21)$$

Étape 2 :

Nous montrons ici qu'il existe deux ensembles $\{\alpha_i\}$ et $\{\beta_j\}$ tels que, pour tout $1 \leq i, j \leq N$,

$$\theta_{ij} = \alpha_i + \beta_j. \quad (3.22)$$

Pour démontrer (3.22), considérons encore l'équation (3.16) et supposons que $\Psi_1(T) = e_1$, ce qui implique que $\Psi_2(T) = e^{i\theta} e_1$. Si l'on laisse le système évoluer librement (avec $\epsilon(T+s) = 0$), la relation (3.17) est encore valable après le temps T . L'équation (3.16) implique

$$\Im(\langle H_1 \Psi_1(T+s), e_k \rangle \langle e_k, \Psi_1(T+s) \rangle) = \Im(\langle H_2 \Psi_2(T+s), e_k \rangle \langle e_k, \Psi_2(T+s) \rangle) \quad s \geq 0. \quad (3.23)$$

Des calculs similaires aux précédents

$$c_{1,i}^1 c_{k,i}^{1*} c_{1,j}^{1*} c_{k,j}^1 = c_{1,i}^2 c_{k,i}^{2*} c_{1,j}^{2*} c_{k,j}^2 \quad \forall i, j = 1, \dots, N. \quad (3.24)$$

Cette relation conjointement avec (3.21) implique

$$\theta_{1i} - \theta_{ki} + \theta_{kj} - \theta_{1j} = 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, N.$$

Plus généralement, en utilisant e_k à la place de e_1 , nous avons

$$\theta_{li} - \theta_{ki} + \theta_{kj} - \theta_{lj} = 0 \quad \forall i, j, k, l = 1, \dots, N, \quad (3.25)$$

et (3.22) en découle quitte à choisir

$$\alpha_i = \theta_{i1}, \quad \beta_j = \theta_{1j} - \theta_{11}.$$

L'unicité de l'Hamiltonien à une transformation unitaire diagonale près a été démontrée. Appliquant cette transformation unitaire à (3.12), nous pouvons supposer $H_1 = H_2$. Démonstrons maintenant que $\mu_1 = \mu_2$, ce qui établit (3.14) pour le cas général.

Étape 3 :

Nous notons par $\sigma_i^1(\gamma)$, $\sigma_i^2(\gamma)$ respectivement les i 'ième valeurs propres de $H + \gamma\mu_1$ et $H + \gamma\mu_2$, γ étant une constante réelle. En plus, nous prenons

$$\omega_{ij}^1(\gamma) = \sigma_j^1(\gamma) - \sigma_i^1(\gamma) \quad \text{et} \quad \omega_{ij}^2(\gamma) = \sigma_j^2(\gamma) - \sigma_i^2(\gamma).$$

En utilisant **(A3)** (pour $\gamma = 0$) et la continuité du spectre par rapport au γ autour de $\gamma = 0$, pour les γ suffisamment petits, nous avons

$$\omega_{ij}^1(\gamma) = \omega_{lk}^2(\gamma) \implies (i, j) = (l, k).$$

Nous choisissons un champ de contrôle de la forme $\gamma + \epsilon(t)$. De cette manière l'Hamiltonien H pour les deux système devient $H + \gamma\mu_1$ et $H + \gamma\mu_2$, tandis que les moments dipolaires restent les mêmes. Les mêmes opérations que celles de l'étape 1 peuvent être considérées. L'hypothèse **A5** est encore valable pour $H + \gamma\mu_1$ lorsque γ est suffisamment petit. La seule modification dans les arguments de l'étape 1 vient du fait que les transitions ω_{ij}^1 et ω_{ij}^2 ne sont pas forcément les mêmes. Il suffit alors de remarquer que dans cette nouvelle situation, chaque terme des deux cotés de (3.19) peut être encore identifié. Cela est dû au fait que, même si $\omega_{ij}^1 \neq \omega_{ij}^2$, il n'existe pas d'autre transition en résonance avec ω_{ij}^1 et ω_{ij}^2 . À la place de (3.19), nous obtenons alors,

$$|c_{1,i}^1(\gamma)| |c_{1,j}^1(\gamma)| = 0 = |c_{1,i}^2(\gamma)| |c_{1,j}^2(\gamma)| \quad \forall i \neq j.$$

L'équation (3.24) est également remplacée par

$$c_{1,i}^1(\gamma)c_{k,i}^{1*}(\gamma)c_{1,j}^{1*}(\gamma)c_{k,j}^1(\gamma) = 0 = c_{1,i}^2(\gamma)c_{k,i}^{2*}(\gamma)c_{1,j}^{2*}(\gamma)c_{k,j}^2(\gamma) \quad \forall i, j = 1, \dots, N.$$

Nous pouvons conclure que, pour γ suffisamment petit,

$$\text{il existe } \{\alpha_n(\gamma)\}, \{\beta_m(\gamma)\} : \quad (\phi_m^1(\gamma))_n = e^{i\alpha_n(\gamma)} e^{i\beta_m(\gamma)} (\phi_m^2(\gamma))_n$$

où $\phi_m^1(\gamma)$ et $\phi_m^2(\gamma)$ sont respectivement les m 'ième valeurs propres de $H + \gamma\mu_1$ et $H + \gamma\mu_2$.

Ensuite, nous utilisons la théorie des perturbations non-dégénérées (voir par exemple[32] Section XI.B) pour écrire

$$\begin{aligned} (\phi_m^1(\gamma))_n &= (\phi_m)_n + \sum_{k \neq m} \gamma \frac{(\mu_1)_{k,m}}{\lambda_m - \lambda_k} (\phi_k)_n + O(\gamma^2) \\ (\phi_m^2(\gamma))_n &= (\phi_m)_n + \sum_{k \neq m} \gamma \frac{(\mu_2)_{k,m}}{\lambda_m - \lambda_k} (\phi_k)_n + O(\gamma^2) \end{aligned}$$

Vu les termes d'ordre zéro, nous avons

$$e^{i\alpha_n(\gamma)} e^{i\beta_m(\gamma)} \rightarrow 1 \quad \text{lorsque } \gamma \rightarrow 0.$$

En utilisant les termes jusqu'au premier ordre

$$\phi_m + \sum_{k \neq m} \gamma \frac{(\mu_1)_{k,m}}{\lambda_m - \lambda_k} \phi_k = e^{i\beta_m(\gamma)} U(\gamma) \phi_m + \sum_{k \neq m} \gamma \frac{(\mu_2)_{k,m}}{\lambda_m - \lambda_k} \phi_k \quad (3.26)$$

où $U(\gamma)$ est la transformation unitaire diagonale $U(\gamma) = \text{diag}(e^{i\alpha_1(\gamma)}, e^{i\alpha_2(\gamma)}, \dots, e^{i\alpha_N(\gamma)})$ écrite dans la base $\{e_i\}_{i=1}^N$. Prenant le produit Hermitien de (3.26) avec ϕ_m , nous avons

$$\langle e^{i\beta_m(\gamma)} U(\gamma)\phi_m, \phi_m \rangle = 1.$$

Comme $U(\gamma)$ est une transformation unitaire, $U(\gamma)\phi_m$ est de norme 1. Cela implique que $U(\gamma)\phi_m = e^{i\alpha(\gamma)}\phi_m$.

Finalement, en prenant le produit Hermitien de (3.26) avec ϕ_k pour $k \neq m$, nous obtenons

$$\frac{(\mu_1)_{k,n}}{\lambda_n - \lambda_k} = \frac{(\mu_2)_{k,n}}{\lambda_n - \lambda_k} \quad \forall k, n = 1, \dots, N$$

ce qui montre que $\mu_1 = \mu_2$ et conclut alors la démonstration.

Remarque 14. Les phases $\{\beta_j\}$ qui multiplient les colonnes de la matrice c^1 n'affectent pas la matrice H_1 (car elles sont des phases qui multiplient les différents vecteurs propres de l'Hamiltonien). Les phases $\{\alpha_i\}$ correspondent à la seule partie non-identifiable du système : $(H_2)_{i,j} = e^{i(\alpha_i - \alpha_j)}(H_1)_{i,j}$.

L'hypothèse **(A5)** interdit la situation où un sous-système de dimension 2 qui évolue librement ($\epsilon(t) \equiv 0$), est découplé du reste du système. Le théorème 12 affaiblit cette hypothèse et donne un résultat plus général sous la seule condition additionnelle d'avoir un système de dimension supérieure à 2.

Théorème 12. La situation est la même que celle du Théorème 11, et nous supposons aussi **(A1)**, **(A2)**, **(A3)** et **(A4)**. Mais, à la place de l'hypothèse **(A5)**, nous supposons que la dimension du système N est supérieure ou égale à 3. Alors la même conclusion est encore valable.

Remarque 15. Il est nécessaire de supposer la dimension supérieure à 2 pour le système, car un système de dimension 2 admet une symétrie additionnelle. Nous pouvons facilement voir que les deux systèmes

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left(\begin{pmatrix} \alpha & z \\ z^* & \beta \end{pmatrix} + \epsilon(t) \begin{pmatrix} \gamma & \xi \\ \xi^* & \delta \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

et

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix} = \left((\lambda_1 + \lambda_2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \alpha & z^* \\ z & \beta \end{pmatrix} - \epsilon(t) \begin{pmatrix} \gamma & \xi^* \\ \xi & \delta \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1 \\ \tilde{\psi}_2 \end{pmatrix},$$

où λ_1 et λ_2 sont les valeurs propres de la matrice

$$H_1 = \begin{pmatrix} \alpha & z \\ z^* & \beta \end{pmatrix}$$

gènèrent les mêmes populations pour tout temps $t > 0$. En fait, si (ψ_1, ψ_2) est une solution du premier système, $(\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2) = (e^{-i(\lambda_1+\lambda_2)t}\psi_1^*, e^{-i(\lambda_1+\lambda_2)t}\psi_2^*)$ est une solution du deuxième. De plus, la matrice

$$H_2 = (\lambda_1 + \lambda_2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \alpha & z^* \\ z & \beta \end{pmatrix}$$

admet les mêmes valeurs propres que H_1 i.e., λ_1 et λ_2 .

Démonstration du Théorème 12 :

Les seules situations à traiter sont :

1. Il y a un sous-espace de dimension 2 engendré par deux vecteurs dans $\{e_i\}_{i=1}^N$ invariant sous l'évolution libre des deux systèmes (par simplicité nous prenons les vecteurs e_1 et e_2 comme générateurs) ;
2. Il y a un élément de la base canonique $\{e_i\}_{i=1}^N$ (prenons e_1 par simplicité) qui coïncide avec un état propre de l'Hamiltonien libre H_1 .

Dans le premier cas, les matrices H_1 et H_2 s'écrivent

$$H_1 = \begin{pmatrix} (M_1)_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & (N_1)_{(N-2) \times (N-2)} \end{pmatrix}, \quad H_2 = \begin{pmatrix} (M_2)_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & (N_2)_{(N-2) \times (N-2)} \end{pmatrix}.$$

L'hypothèse de la contrôlabilité du premier système implique que le moment dipolaire μ_1 doit coupler le sous-système de dimension 2 engendré par e_1 et e_2 avec le reste du système. Nous pouvons supposer, par exemple, le coefficient $(\mu_1)_{1k}$ non-nul (pour un certain $2 < k \leq N$). Ensuite, comme dans la preuve du Théorème 11, nous considérons les matrices $H_1 + \gamma\mu_1$ et $H_2 + \gamma\mu_2$ où γ est une constante positive suffisamment petite. La matrice $H_1 + \gamma\mu_1$ satisfait l'hypothèse **(A5)** pour le paramètre $\gamma \neq 0$ suffisamment petit. Via la théorie des perturbations non-dégénérées

$$(\phi_m^1(\gamma))_n = (\phi_m^1)_n + \sum_{k \neq m} \gamma \frac{(\mu_1)_{k,m}}{\lambda_m - \lambda_k} (\phi_k^1)_n + O(\gamma^2) \quad (3.27)$$

$$(\phi_m^2(\gamma))_n = (\phi_m^2)_n + \sum_{k \neq m} \gamma \frac{(\mu_2)_{k,m}}{\lambda_m - \lambda_k} (\phi_k^2)_n + O(\gamma^2), \quad (3.28)$$

et avec des arguments similaires aux précédents,

$$\forall \gamma > 0, \quad \text{il existe } \{\alpha_n(\gamma)\} \text{ et } \{\beta_m(\gamma)\} : \quad (\phi_m^1(\gamma))_n = e^{i\alpha_n(\gamma)} e^{i\beta_m(\gamma)} (\phi_m^2(\gamma))_n.$$

Les termes de la phase $\alpha_n(\gamma)$ et $\beta_m(\gamma)$ prennent leurs valeurs dans un intervalle compact $[0, 2\pi]$. En faisant tendre γ vers zéro, nous pouvons extraire une sous-suite $(\gamma_i)_{i=1}^\infty \searrow 0$ telle que

$$\forall n, m = 1..N, \quad \alpha_n(\gamma_i) \rightarrow \alpha_n \quad \text{et} \quad \beta_m(\gamma_i) \rightarrow \beta_m \quad \text{lorsque} \quad i \rightarrow \infty$$

pour certaines phases α_n et β_m dans $[0, 2\pi]$. Passant à la limite dans les équations (3.27) et (3.28),

$$(\phi_m^1)_n = e^{i\alpha_n} e^{i\beta_m} (\phi_m^2)_n.$$

Cela conclut la preuve de la relation (3.15). D'une façon similaire, considérant les termes du premier ordre $\sum_{k \neq m} \gamma \frac{(\mu_1)_{k,m}}{\lambda_m - \lambda_k} (\phi_k^1)_n$ et $\sum_{k \neq m} \gamma \frac{(\mu_2)_{k,m}}{\lambda_m - \lambda_k} (\phi_k^2)_n$, nous pouvons montrer que (3.14) est aussi satisfaite.

Le deuxième cas correspond à la situation où e_1 coïncide avec un état propre ϕ_k^1 de l'Hamiltonien H_1 . Une fois de plus, considérons les deux systèmes $(H_1 + \gamma\mu_1, \mu_1)$ et $(H_2 + \gamma\mu_2, \mu_2)$ pour un petit paramètre γ . Le premier système est encore contrôlable. De plus, soit il satisfait l'hypothèse **(A5)** soit il peut être inclus dans la première situation présentée ci-dessus. Comme le système $(H_1 + \gamma\mu_1, \mu_1)$ est identifiable en passant à la limite lorsque γ tend vers zéro, le système initial (H_1, μ_1) est aussi identifiable, ce qui conclut la démonstration.

3.2 Vers un algorithme numérique

3.2.1 Identification optimale

Cette Section présente une approche numérique pour le problème d'identification dans le même esprit que [46]. Nous considérons le problème inverse posé dans l'Introduction dans sa configuration **(S2)**, où les données sont les populations p_i sur les vecteurs de la base canonique $\{e_i\}_{i=1}^N$ et nous identifions l'Hamiltonien H et le moment dipolaire μ . Par simplicité, cette section utilise la terminologie d'*identification des paramètres*, où les paramètres sont les coefficients de l'Hamiltonien et du moment dipolaire. Ces paramètres résident dans $\mathbb{R}^{N \times N} \times \mathbb{R}^{N \times N}$.

L'approche numérique consiste à corriger le champ de contrôle d'une façon itérative, afin de restreindre de plus en plus l'ensemble de paramètres compatibles avec les données expérimentales. Comme il est indiqué dans [46], l'approche consiste en une procédure d'itération en deux étapes

l'étape d'inversion produit le champ, soumet les données pour le processus d'inversion et obtient une famille d'Hamiltoniens et de moments dipolaires compatibles avec les mesures ;

l'étape de la sélection du contrôle sélectionne de nouveaux champs de test et retourne à la première étape si le résultat n'est pas satisfaisant.

En pratique, il n'est pas possible d'explorer l'ensemble entier d'Hamiltoniens et de moments dipolaires cohérents avec les données. Nous supposons que l'ensemble \mathcal{A} de paramètres admissibles est restreint par un cube centré autour de vrais paramètres (inconnus), dans l'espace $\mathbb{R}^{N \times N} \times \mathbb{R}^{N \times N}$: $\mathcal{A} = [H_-, H_+] \times [\mu_-, \mu_+]$, i.e. $(H, \mu) \in \mathcal{A}$ si et seulement si $H_{ij} \in [(H_-)_{ij}, (H_+)_{ij}]$ et $\mu_{ij} \in [(\mu_-)_{ij}, (\mu_+)_{ij}]$ pour $i, j = 1, \dots, N$. Dans les situations

réelles, les paramètres sont connus à certaines incertitudes près, ce qui est cohérent avec cette image.

Un seul champ de contrôle $\epsilon(t)$ aboutit généralement à un ensemble de différents paramètres admissibles qui reproduisent tous les données du laboratoire dans un seuil de tolérance. Nous pouvons espérer qu'à travers les itérations, cette famille se réduit à une distribution serrée d'Hamiltoniens et de moments dipolaires. L'algorithme d'identification consiste à minimiser, sur l'ensemble de tous les champs de contrôle $\epsilon(t)$, le volume du domaine d'admissibilité des paramètres. Pour calculer le diamètre de ce domaine, une méthode est de numéroter la famille complète d'Hamiltoniens et de moments dipolaires cohérents avec les données observées [46].

Afin de réduire le coût des calculs, une seconde méthode est proposée ici, basée sur une définition alternative du diamètre. Nous avons seulement besoin de caractériser deux paires différentes (Hamiltonien, moment dipolaire) : une près de (H_-, μ_-) et l'autre près de (H_+, μ_+) . La distance entre ces deux paires est utilisée comme une estimée du diamètre du domaine.

3.2.2 Étape d'inversion

L'identification des paramètres cohérents avec l'ensemble des données du laboratoire, $p_k^{(lab)} = \{p_{k,1}^{(lab)}, \dots, p_{k,N}^{(lab)}\}$ pour le k 'ième champ de test, et qui sont proches des extrémités de \mathcal{A} , nécessite la minimisation de la différence entre les données du laboratoire et les observables calculés $p_{k,i}[H, \mu, \epsilon_k(t)]$ aussi bien que la distance des paramètres par rapport aux limites de l'ensemble \mathcal{A} . À cette fin, nous introduisons la fonctionnelle de coût

$$J(H, \mu; \epsilon_k, \tilde{H}, \tilde{\mu}) = \sum_{i=1}^N \frac{|p_{k,i}[H, \mu, \epsilon_k(t)] - p_{k,i}^{(lab)}|^2}{|p_{k,i}^{(lab)}|^2} + \alpha \text{dist}(H, \tilde{H}) + \alpha \text{dist}(\mu, \tilde{\mu}) \quad (3.29)$$

où $\alpha \in \mathbb{R}$ est un facteur de pénalisation. Dans le test numérique de cette Section α est 0.05. La "distance relative" est définie par

$$\text{dist}(H, K) = \sum_{i,j=1}^N \frac{|H_{ij} - K_{ij}|^2}{|K_{ij}|^2}. \quad (3.30)$$

Notons que celle-ci ne définit pas une métrique (dans le sens topologique usuel) car elle n'est pas symétrique. La minimisation des fonctionnelles de coût $J(\cdot, \cdot; \epsilon_k, H_-, \mu_-)$ et $J(\cdot, \cdot; \epsilon_k, H_+, \mu_+)$ sur l'ensemble \mathcal{A} fournit deux solutions différentes pour le processus d'inversion près de deux extrémités de l'ensemble \mathcal{A}

$$\begin{aligned} (H_{\inf}(\epsilon_k, H_-, \mu_-), \mu_{\inf}(\epsilon_k, H_-, \mu_-)) &= \text{argmin}_{(H,\mu)} J(H, \mu; \epsilon_k, H_-, \mu_-) \\ (H_{\sup}(\epsilon_k, H_+, \mu_+), \mu_{\sup}(\epsilon_k, H_+, \mu_+)) &= \text{argmin}_{(H,\mu)} J(H, \mu; \epsilon_k, H_+, \mu_+). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Des méthodes variées peuvent être utilisées pour le problème de minimisation. Ici, nous utilisons un simplex Nelder-Mead modifié [12]. Pour bénéficier des itérations précédentes, et pour améliorer la qualité d'inversion, une troisième boucle externe est ajoutée à la procédure. Cela permet de changer les limites de l'ensemble \mathcal{A} lorsque des bons candidats sont trouvés : H_- et H_+ sont remplacés par H_{inf} et H_{sup} quand certaines conditions appropriées sont satisfaites.

Remarque 16. *Différentes fonctionnelles peuvent être considérées pour améliorer la définition (3.30) : l'entropie relative de Kullback-Leibler [69, 70] interprète les coefficients $|K_{ij}|$ et $|H_{ij}|$ dans un cadre probabiliste. Ces considérations qui doivent être pertinentes, surtout en pratique, ne seront pas développées ici car nous nous concentrons sur la faisabilité de l'inversion des données.*

3.2.3 Étape de la sélection du contrôle

Dans cette étape, l'algorithme cherche un nouveau champ de test ϵ_{k+1} qui diminue la valeur courante de la fonctionnelle de coût

$$\mathcal{J}(\epsilon_k; H_-, H_+, \mu_-, \mu_+) = \text{dist}(H_{\text{inf}}(\epsilon_k, H_-, \mu_-), H_{\text{sup}}(\epsilon_k, H_+, \mu_+)) + \text{dist}(\mu_{\text{inf}}(\epsilon_k, H_-, \mu_-), \mu_{\text{sup}}(\epsilon_k, H_+, \mu_+)). \quad (3.32)$$

pour produire des données plus discriminantes.

Plus de détails sur cette approche seront donnés dans la sous-section suivante.

3.2.4 Illustration numérique

Dans cette sous-section nous considérons le système à 4 états

$$i \frac{d}{dt} \Psi = (H + \epsilon(t)\mu) \Psi$$

où

$$H = \begin{pmatrix} 0.0833 & -0.0038 & -0.0087 & 0.0041 \\ -0.0038 & 0.0647 & 0.0083 & 0.0038 \\ -0.0087 & 0.0083 & 0.0036 & -0.0076 \\ 0.0041 & 0.0038 & -0.0076 & 0.0357 \end{pmatrix}, \quad \mu = \begin{pmatrix} 0 & 5 & -1 & 0 \\ 5 & 0 & 6 & -1.5 \\ -1 & 6 & 0 & 7 \\ 0 & -1.5 & 7 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

Nous diagonalisons la matrice H

$$H = P D P^{-1}, \quad D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0365 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0651 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0857 \end{pmatrix}, \quad P = \exp(\mathcal{P}),$$

où

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

est une matrice anti-Hermitienne. Comme il est mentionné dans la Section 3.1, la spectroscopie nous permet de supposer que la matrice D est connue, quitte à l'additionner avec une constante globale. Ainsi le but d'identification est de retrouver le moment dipolaire μ et la matrice de rotation \mathcal{P} (ou son logarithme \mathcal{P}).

Nous allons supposer que μ et H sont initialement connus à 10% d'erreur relative près, ce qui correspond à 10% d'erreur relative sur μ et presque 5% d'erreur relative sur \mathcal{P} . Via les estimations fournies par les techniques ab initio de la mécanique quantique, cette taille initiale pour le domaine d'admissibilité est raisonnable en pratique.

Les champs de laser sont choisis de la forme suivante

$$\epsilon(t) = \beta \sigma(t) \sum_{i \neq j} \sin(\omega_{ij}t + \theta_{ij})$$

où β est une constante fixée, $\sigma(t)$ est une enveloppe Gaussienne et $\omega_{ij} = \lambda_j - \lambda_i$ est la fréquence de transition entre les états propres i et j de H . Les phases θ_{ij} sont des paramètres du contrôle. Des champs plus généraux peuvent être appliqués où les amplitudes β_{ij} sont des paramètres du contrôle en plus.

Nous adaptions maintenant l'algorithme d'identification présenté plus haut pour ce problème. En pratique, nous modifions la fonctionnelle de coût $J(\mathcal{P}, \mu; \epsilon_k, \mathcal{P}_-, \mu_-)$ définie par l'équation (3.29), de la façon suivante :

$$\tilde{J} = \begin{cases} 0 & \text{si } J(\mathcal{P}, \mu) < \mathcal{C}_1, \\ |J(\mathcal{P}, \mu) - \mathcal{C}_1|/20\mathcal{C}_1 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.34)$$

Ici \mathcal{C}_1 est une petite constante de tolérance fixée à l'avance (initialement $\mathcal{C}_1 = 0.05$ mais ensuite elle décroît durant les itérations comme on le verra plus bas). La fonctionnelle de coût $\mathcal{J}(\epsilon; \mathcal{P}_-, \mathcal{P}_+, \mu_-, \mu_+)$ est définie par les itérations :

1. Utiliser un algorithme simplex pour minimiser la fonctionnelle de coût $\tilde{J}(\mathcal{P}, \mu; \epsilon, \mathcal{P}_-, \mu_-)$ par rapport à \mathcal{P} et μ , jusqu'à ce que $\tilde{J}(\mathcal{P}, \mu; \epsilon, \mathcal{P}_-, \mu_-) < \mathcal{C}_2$ (typiquement $\mathcal{C}_2 = 5 \times 10^{-3}$). Cela donne des paramètres presque optimaux $\mathcal{P}_{\text{inf}}(\epsilon; \mathcal{P}_-, \mu_-)$ et $\mu_{\text{inf}}(\epsilon; \mathcal{P}_-, \mu_-)$.
2. Utiliser un algorithme simplex pour minimiser la fonctionnelle de coût $\tilde{J}(\mathcal{P}, \mu; \epsilon, \mathcal{P}_+, \mu_+)$, jusqu'à ce que $\tilde{J}(\mathcal{P}, \mu; \epsilon, \mathcal{P}_+, \mu_+) < \mathcal{C}_2$. Cela implique certains $\mathcal{P}_{\text{sup}}(\epsilon; \mathcal{P}_+, \mu_+)$ et $\mu_{\text{sup}}(\epsilon; \mathcal{P}_+, \mu_+)$.
3. Choisir la fonctionnelle de coût

$$\mathcal{J}(\epsilon; \mathcal{P}_-, \mathcal{P}_+, \mu_-, \mu_+) = \text{dist}(\mu_{\text{inf}}, \mu_{\text{sup}}) + \text{dist}(\mathcal{P}_{\text{inf}}, \mathcal{P}_{\text{sup}}).$$

L'algorithme suivant est utilisé pour identifier l'Hamiltonien et le moment dipolaire :

1. Poser $D_1 = \text{dist}(\mathcal{P}_-, \mathcal{P}_+)$ et $D_2 = (\mu_-, \mu_+)$.
2. Initialiser le champ de laser $\epsilon(t)$ en choisissant les phases $\phi_{ij} \in [-\pi, \pi]$ d'une façon aléatoire.
3. Utiliser un algorithme de simplex pour minimiser la fonctionnelle de coût $\mathcal{J}(\epsilon; \mu_-, \mu_+, \mathcal{P}_-, \mathcal{P}_+)$ par rapport à $\epsilon(t)$ et pour trouver un $\epsilon(\mu_-, \mu_+, \mathcal{P}_-, \mathcal{P}_+)$ et les Hamiltoniens et moments dipolaires correspondants : $\mathcal{P}_{\text{inf}}(\epsilon)$, $\mathcal{P}_{\text{sup}}(\epsilon)$, $\mu_{\text{inf}}(\epsilon)$ et $\mu_{\text{sup}}(\epsilon)$. En chaque itération du simplex calculer la valeur $\text{dist}(\mathcal{P}_{\text{sup}}(\epsilon), \mathcal{P}_{\text{inf}}(\epsilon))$ et vérifier si elle est inférieure à D_1 ou pas. Si c'est le cas, remplacer \mathcal{P}_- par $\mathcal{P}_{\text{inf}}(\epsilon)$ et \mathcal{P}_+ par $\mathcal{P}_{\text{sup}}(\epsilon)$, et ensuite mettre à jour la constante D_1 . En même temps nous mettons à jour \mathcal{C}_1 en la divisant par $\sqrt{2}$ (Une telle mise-à-jour nous conduit à un critère d'arrêt plus restreignant pour le simplex interne). Faire les mêmes opérations pour le moment dipolaire : i.e. calculer la valeur $\text{dist}(\mu_{\text{sup}}(\epsilon), \mu_{\text{inf}}(\epsilon))$ et vérifier si elle est inférieure à D_2 ou pas. Si c'est le cas, remplacer μ_- par $\mu_{\text{inf}}(\epsilon)$ et μ_+ par $\mu_{\text{sup}}(\epsilon)$, mettre à jour D_2 et \mathcal{C}_1 et continuer le simplex. Le simplex s'arrête lorsque les deux critères suivants sont satisfaits :
 - $\mathcal{J}(\epsilon) < \mathcal{C}_3$
 - $\tilde{J}(\mathcal{P}_{\text{inf}}, \mu_{\text{inf}}; \epsilon, \mathcal{P}_-, \mu_-) = 0$ or $\tilde{J}(\mathcal{P}_{\text{sup}}, \mu_{\text{sup}}; \epsilon, \mathcal{P}_+, \mu_+) = 0$
 où \mathcal{C}_3 est une petite constante de tolérance (ici $\mathcal{C}_3 = .01$).

Cet algorithme a été testé sur le système (3.33).

Remarque 17. *Les constantes de tolérance \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 sont pertinentes pour résoudre le problème d'optimisation mais peuvent aussi être utilisées pour compenser les bruits. Le paramètre \mathcal{C}_1 est une mesure de l'erreur des données et il décroît d'une grande valeur (pertinente du point de vue numérique) à une valeur finale non-nulle qui est une image de la nature des erreurs dans les données.*

Notons aussi que \mathcal{C}_1 est pertinente pour assurer que les paramètres inversés restent dans un seuil donné où la recherche est effectuée. Dans une méthode parfaite d'optimisation, il n'y a pas besoin de limiter le domaine de recherche car le résultat de cette section garantit que la solution est unique. Une fois que les efforts numériques sont pris en compte, les limitations non seulement aident à accélérer la convergence, mais aussi aident à prendre en compte le problème de non-unicité induit par la présence des bruits. Dans les situations pratiques, avec les bruits inclus, les bornes sur H_0 et μ doivent être choisies séparément des bornes sur les erreurs dans les données : i.e., \mathcal{C}_1 sera séparée en deux constantes, une correspondant aux erreurs dans les données et l'autre correspondant aux bornes des paramètres.

Le temps de simulation est $T = 20000$, ce qui correspond presque à 100 périodes de transitions avec la plus petite fréquence. L'amplitude du champ de laser est fixée à 0.1 et l'enveloppe Gaussienne est $\sigma(t) = \exp(0.7 \times 10^{-7}(t - \frac{T}{2})^2)$. Après 7 itérations pour

le champ $\epsilon(t)$, l'algorithme simplex externe finit par converger, le diamètre du domaine d'admissibilité correspondant au champ de laser final étant 6.258×10^{-3} . Nous avons alors

$$\tilde{J}(\mathcal{P}, \mu; \epsilon_c, \mathcal{P}_+, \mu_+) = \tilde{J}(\mathcal{P}, \mu; \epsilon, \mathcal{P}_-, \mu_-) = 0.$$

Les solutions μ et \mathcal{P} sont données par

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1.023 & -.995 & 1.043 \\ -1.023 & 0 & .988 & .971 \\ .995 & -.988 & 0 & -1.003 \\ -1.043 & -.971 & 1.003 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mu = \begin{pmatrix} 0 & 4.992 & -1.012 & -2.28e-03 \\ 4.992 & 0 & 5.989 & -1.489 \\ -1.012 & 5.989 & 0 & 7.022 \\ -2.28e-03 & -1.489 & 7.022 & 0 \end{pmatrix},$$

ce qui correspond à un voisinage de la matrice physique avec 2% d'erreur relative.

Remarque 18. *La constante de pénalisation α et les constantes de tolérance \mathcal{C}_1 , \mathcal{C}_2 et \mathcal{C}_3 ont besoin d'être convenablement choisies. Les propriétés de convergence et les résultats sont très sensibles à ces valeurs. Lorsque ces paramètres prennent des valeurs trop petites, l'algorithme a des difficultés pour recouvrir les bonnes solutions et peut être facilement bloqué dans un minimum local. D'autre part, les grandes valeurs pour ces paramètres ralentissent la convergence, où même empêchent celle-ci. À ce stade, il n'y a pas de méthodes systématiques pour déterminer ces constantes, mais les adaptations de l'algorithme pour le rendre moins sensible à ces valeurs semblent être liées à une définition plus commode de \tilde{J} (voir la Remarque 16).*

Nous concluons cette section en insistant sur le fait qu'il y a certainement des possibilités pour améliorer la stratégie numérique. La stratégie présentée ici a pour but seulement de démontrer la faisabilité de l'approche. D'autre part des travaux généraux comme ceux dans [40] sur les systèmes bilinéaires peuvent être utiles pour trouver des algorithmes plus efficaces.

Chapitre 4

Mesure continue d'un ensemble statistique

Après avoir étudié la contrôlabilité et la génération de trajectoires en boucle ouverte dans les chapitres précédents, le contrôle par feedback est la prochaine étape dans l'étude des systèmes quantiques. La différence fondamentale entre le contrôle par feedback au sens classique et au sens quantique est due au fait qu'observer un système le perturbe.

L'idée exploitée dans les travaux antérieurs consiste à ouvrir le système aux fluctuations induites par l'environnement. La description des systèmes ouverts se fait, essentiellement, à l'aide de l'opérateur densité. Ce dernier remplace la fonction d'onde de la mécanique quantique élémentaire. Nous avons ainsi la possibilité d'analyser le comportement d'un ensemble statistique des systèmes [116, 55, 4] aussi bien que celui d'un système unique [48, 118, 133].

Pour éviter le phénomène d'écroulement du paquet d'onde suite à la mesure, nous considérons un ensemble de systèmes quantiques identiquement préparés (avec les mêmes états initiaux). Chaque membre de l'ensemble subit une évolution identique. La dynamique considérée représente la moyenne des dynamiques de tous ces membres, tandis que l'observation porte sur un élément aléatoire de cet ensemble. Ainsi le côté destructeur du concept de mesure disparaît. Cette approche a été déjà considérée dans d'autres contextes (voir par exemple [116, 4]).

Nous essayons de coupler le système à un appareil de mesure qui perturbe faiblement le système. Cette perturbation peut être dans certains cas négligeable lorsque la dynamique associée à la mesure est beaucoup plus rapide que la dynamique du système principal.

Dans la Section suivante, nous présentons la dynamique d'un système à 3 états couplé à un champ de laser cohérent et résonnant. Ici, nous considérons également les émissions spontanées. Nous supposons qu'un des états excités est très instable et se désexcite rapidement sur l'état fondamental en émettant des photons. Lorsque quelques fréquences du laser sont en résonance avec cet état instable, nous démontrons à l'aide des techniques adiabatiques (systèmes lents/rapides) le résultat suivant : le nombre moyen des photons

(signal du photo-détecteur) peut être interprété comme une mesure continue de quelques composantes de la matrice densité correspondant à l'évolution cohérente des deux autres états. Ces deux états construisent le sous-système lent.

Plus précisément, nous montrons qu'une telle mesure continue perturbe l'équation maîtresse du sous-système lent, seulement via les termes du deuxième ordre. Ainsi, dans une première approximation, nous pouvons négliger ces termes de décohérence. Nous avons alors un système à deux états, représenté par un vecteur sur la sphère de Bloch avec une mesure continue qui dépend de l'amplitude du laser (voir le système (4.4)). Dans la Section 4.2, nous proposons pour (4.4) un régulateur simple du type PI.

Dans la Section 4.3, nous étendons les calculs de la Section 4.1 au cas général d'une équation maîtresse du type Lindblad. Nous démontrons que l'équation maîtresse lente est encore sous la forme Lindblad et que la décohérence due à l'état très instable est maintenant du deuxième ordre et peut être négligée.

Les résultats de ce chapitre font l'objet d'un rapport interne [93].

4.1 Système à 3 états

Prenons un atome à 3 états couplé avec des champs de laser résonnants. Notons les trois états de l'atome par $|1\rangle$, $|2\rangle$ et $|3\rangle$ correspondant respectivement aux énergies E_1 , E_2 et E_3 où $E_1 < E_2, E_3$. Nous considérons ici les équations de Bloch-optique qui prennent en compte l'émission spontanée (voir par exemple, [34, 6]). Le système sans contrôle est modélisé par les équations suivantes avec $\omega_{ij} = \frac{E_i - E_j}{\hbar}$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\sigma_1 &= \Gamma_2\sigma_2 + \Gamma_3\sigma_3 \\ \frac{d}{dt}\sigma_2 &= -\Gamma_2\sigma_2 \\ \frac{d}{dt}\sigma_3 &= -\Gamma_3\sigma_3 \\ \frac{d}{dt}\sigma_{12} &= -i\omega_{12}\sigma_{12} - \frac{\Gamma_2}{2}\sigma_{12} \\ \frac{d}{dt}\sigma_{23} &= -i\omega_{23}\sigma_{23} - \frac{(\Gamma_2 + \Gamma_3)}{2}\sigma_{23} \\ \frac{d}{dt}\sigma_{31} &= -i\omega_{31}\sigma_{31} - \frac{\Gamma_3}{2}\sigma_{31}. \end{aligned}$$

Les termes $\{\sigma_i\}$ correspondent aux populations de différents états, et les termes σ_{ij} sont les termes de cohérence. On peut facilement voir que la quantité $\text{Tr}[\sigma] = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$ est conservée durant l'évolution du système. Nous avons supposé que la relaxation est seulement due à l'émission spontanée, où Γ_2^{-1} et Γ_3^{-1} sont respectivement les durées de vie atomiques des états $|2\rangle$ et $|3\rangle$.

Prenons maintenant en compte l'effet du laser. Nous supposons que le laser agit sur le système à travers les transitions entre les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$, les états $|2\rangle$ et $|3\rangle$ et les états $|3\rangle$ et $|1\rangle$. L'Hamiltonien de couplage est donné par :

$$\hbar [a_{12} u (|1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|) + a_{23} u (|2\rangle \langle 3| + |3\rangle \langle 2|) + a_{31} u (|3\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 3|)]$$

où a_{12} , a_{23} et a_{31} sont des coefficients réels. Un calcul simple montre que dans la description de la matrice densité, les équations, lorsque l'effet du contrôle est pris en compte, peuvent être écrites sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\sigma_1 &= \Gamma_2\sigma_2 + \Gamma_3\sigma_3 - 2 a_{12} u \Im(\sigma_{12}) + 2 a_{31} u \Im(\sigma_{31}) \\ \frac{d}{dt}\sigma_2 &= -\Gamma_2\sigma_2 - 2 a_{23} u \Im(\sigma_{23}) + 2 a_{12} u \Im(\sigma_{12}) \\ \frac{d}{dt}\sigma_3 &= -\Gamma_3\sigma_3 - 2 a_{31} u \Im(\sigma_{31}) + 2 a_{23} u \Im(\sigma_{23}) \\ \frac{d}{dt}\sigma_{12} &= -i\omega_{12}\sigma_{12} - \frac{\Gamma_2}{2}\sigma_{12} + i a_{12} u \sigma_1 - i a_{12} u \sigma_2 - i a_{31} u \sigma_{23}^* + i a_{23} u \sigma_{31}^* \\ \frac{d}{dt}\sigma_{23} &= -i\omega_{23}\sigma_{23} - \frac{(\Gamma_2 + \Gamma_3)}{2}\sigma_{23} + i a_{23} u \sigma_2 - i a_{23} u \sigma_3 - i a_{12} u \sigma_{31}^* + i a_{31} u \sigma_{23}^* \\ \frac{d}{dt}\sigma_{31} &= -i\omega_{31}\sigma_{31} - \frac{\Gamma_3}{2}\sigma_{31} + i a_{31} u \sigma_3 - i a_{31} u \sigma_1 - i a_{23} u \sigma_{12}^* + i a_{12} u \sigma_{31}^* \end{aligned}$$

où \Im et $*$ signifient respectivement la partie imaginaire et le complexe conjugué d'un nombre complexe.

Nous supposons le champ de laser résonnant avec les fréquences atomiques effectives :

$$u = \frac{v_{12}}{a_{12}} e^{i\omega_{12}t} + \frac{v_{23}}{a_{23}} e^{i\omega_{23}t} + \frac{v_{31}}{a_{31}} e^{i\omega_{31}t} + C.C.$$

où $C.C.$ signifie le complexe conjugué et v_{12} , v_{23} , v_{31} sont des amplitudes complexes.

4.1.1 Approximation des champs tournants

Nous supposons ici que les fréquences $|\omega_{12}|$, $|\omega_{23}|$ et $|\omega_{31}|$ sont différentes et que les durées de vie atomiques des états $|2\rangle$ et $|3\rangle$ sont suffisamment longues pour avoir

$$\Gamma_2, \Gamma_3 \ll |\omega_{12}|, |\omega_{23}|, |\omega_{31}|.$$

Nous supposons aussi que les amplitudes de laser ne sont pas très grandes :

$$|v_{12}|, |v_{23}|, |v_{31}| \ll |\omega_{12}|, |\omega_{23}|, |\omega_{31}|.$$

Toutes ces hypothèses ensemble nous permettent d'appliquer l'*approximation des champs tournants*. En considérant le changement de variables, dépendant du temps :

$$\tilde{\sigma}_{12} = e^{i\omega_{12}t} \sigma_{12}, \quad \tilde{\sigma}_{23} = e^{i\omega_{23}t} \sigma_{23} \quad \text{et} \quad \tilde{\sigma}_{31} = e^{i\omega_{31}t} \sigma_{31}$$

et en éliminant les termes de hautes fréquences, nous obtenons le système moyen suivant :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\sigma_1 &= \Gamma_2\sigma_2 + \Gamma_3\sigma_3 + \iota (v_{12}\tilde{\sigma}_{12} - v_{12}^*\tilde{\sigma}_{12}^*) - \iota (v_{31}\tilde{\sigma}_{31} - v_{31}^*\tilde{\sigma}_{31}^*) \\
\frac{d}{dt}\sigma_2 &= -\Gamma_2\sigma_2 + \iota (v_{23}\tilde{\sigma}_{23} - v_{23}^*\tilde{\sigma}_{23}^*) - \iota (v_{12}\tilde{\sigma}_{12} - v_{12}^*\tilde{\sigma}_{12}^*) \\
\frac{d}{dt}\sigma_3 &= -\Gamma_3\sigma_3 + \iota (v_{31}\tilde{\sigma}_{31} - v_{31}^*\tilde{\sigma}_{31}^*) - \iota (v_{23}\tilde{\sigma}_{23} - v_{23}^*\tilde{\sigma}_{23}^*) \\
\frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_{12} &= -\frac{\Gamma_2}{2}\tilde{\sigma}_{12} + \iota v_{12}^*(\sigma_1 - \sigma_2) - \iota v_{31}\tilde{\sigma}_{23}^* + \iota v_{23}\tilde{\sigma}_{31}^* \\
\frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_{23} &= -\frac{(\Gamma_2 + \Gamma_3)}{2}\tilde{\sigma}_{23} + \iota v_{23}^*(\sigma_2 - \sigma_3) - \iota v_{12}\tilde{\sigma}_{31}^* + \iota v_{31}\tilde{\sigma}_{12}^* \\
\frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_{31} &= -\frac{\Gamma_3}{2}\tilde{\sigma}_{31} + \iota v_{31}^*(\sigma_3 - \sigma_1) - \iota v_{23}\tilde{\sigma}_{12}^* + \iota v_{12}\tilde{\sigma}_{23}^*.
\end{aligned}$$

4.1.2 Approximation adiabatique

Dans un premier temps, nous pouvons facilement voir que la conservation de probabilité est toujours satisfaite : $\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 = 1$ reste constante durant l'évolution du système. Ainsi nous pouvons éliminer l'équation correspondante à $\frac{d}{dt}\sigma_1$, seulement en remplaçant σ_1 par $1 - \sigma_2 - \sigma_3$. Nous avons

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\sigma_2 &= -\Gamma_2\sigma_2 + \iota (v_{23}\tilde{\sigma}_{23} - v_{23}^*\tilde{\sigma}_{23}^*) - \iota (v_{12}\tilde{\sigma}_{12} - v_{12}^*\tilde{\sigma}_{12}^*) \\
\frac{d}{dt}\sigma_3 &= -\Gamma_3\sigma_3 + \iota (v_{31}\tilde{\sigma}_{31} - v_{31}^*\tilde{\sigma}_{31}^*) - \iota (v_{23}\tilde{\sigma}_{23} - v_{23}^*\tilde{\sigma}_{23}^*) \\
\frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_{12} &= -\frac{\Gamma_2}{2}\tilde{\sigma}_{12} + \iota v_{12}^*(1 - 2\sigma_2 - \sigma_3) - \iota v_{31}\tilde{\sigma}_{23}^* + \iota v_{23}\tilde{\sigma}_{31}^* \\
\frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_{23} &= -\frac{(\Gamma_2 + \Gamma_3)}{2}\tilde{\sigma}_{23} + \iota v_{23}^*(\sigma_2 - \sigma_3) - \iota v_{12}\tilde{\sigma}_{31}^* + \iota v_{31}\tilde{\sigma}_{12}^* \\
\frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_{31} &= -\frac{\Gamma_3}{2}\tilde{\sigma}_{31} + \iota v_{31}^*(-1 + \sigma_2 + 2\sigma_3) - \iota v_{23}\tilde{\sigma}_{12}^* + \iota v_{12}\tilde{\sigma}_{23}^*.
\end{aligned}$$

Jusqu'ici, nous avons parlé des relations entre les grandeurs de tous les paramètres présents dans le modèle sauf entre les deux durées de vie Γ_2 et Γ_3 . En fait, la contribution principale de ce chapitre est d'introduire un appareil de mesure similaire aux appareils de mesure classiques, permettant de planifier les feedbacks continus en temps. Pour ce but nous supposons la relation suivante entre les durées de vie atomiques satisfaite : $\Gamma_2 \ll \Gamma_3$. Le fait que la durée de vie du troisième état (Γ_3^{-1}) est beaucoup plus courte que celle du deuxième état (Γ_2^{-1}), implique que la dynamique de l'évolution de la population du troisième état est beaucoup plus rapide que celle du deuxième. C'est pourquoi le troisième état peut être vu comme une partie de l'appareil de mesure.

On excite le premier et le deuxième état à l'aide d'un laser résonnant avec les fréquences $|\omega_{13}|$ et $|\omega_{23}|$. Une partie de la population passe sur le troisième état. Mais cette population est très instable comparée à celle du deuxième état et donc, par l'émission spontanée, cette population se désexcite vers le reste du système et cela en émettant des photons dans toutes les directions. En captant ces photons, nous pouvons mesurer la population du troisième état.

Revenons maintenant aux équations. Les inégalités

$$|v_{12}|, |v_{23}|, |v_{31}|, \Gamma_2 \ll \Gamma_3$$

nous permettent d'utiliser l'approximation adiabatique (techniques de perturbation singulière) [65]. Prenons $\Gamma_3 = \bar{\Gamma}_3/\epsilon$ où $0 < \epsilon \ll 1$ et $\bar{\Gamma}_3$ est du même ordre que Γ_2 . Les dynamiques s'écrivent

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\sigma_2 &= -\Gamma_2\sigma_2 + \iota(v_{23}\tilde{\sigma}_{23} - v_{23}^*\tilde{\sigma}_{23}^*) - \iota(v_{12}\tilde{\sigma}_{12} - v_{12}^*\tilde{\sigma}_{12}^*) \\ \frac{d}{dt}\sigma_3 &= -\frac{\bar{\Gamma}_3}{\epsilon}\sigma_3 + \iota(v_{31}\tilde{\sigma}_{31} - v_{31}^*\tilde{\sigma}_{31}^*) - \iota(v_{23}\tilde{\sigma}_{23} - v_{23}^*\tilde{\sigma}_{23}^*) \\ \frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_{12} &= -\frac{\Gamma_2}{2}\tilde{\sigma}_{12} + \iota v_{12}^*(1 - 2\sigma_2 - \sigma_3) - \iota v_{31}\tilde{\sigma}_{23}^* + \iota v_{23}\tilde{\sigma}_{31}^* \\ \frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_{23} &= -\frac{\bar{\Gamma}_3}{2\epsilon}\tilde{\sigma}_{23} - \frac{\Gamma_2}{2}\tilde{\sigma}_{23} + \iota v_{23}^*(\sigma_2 - \sigma_3) - \iota v_{12}\tilde{\sigma}_{31}^* + \iota v_{31}\tilde{\sigma}_{12}^* \\ \frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_{31} &= -\frac{\bar{\Gamma}_3}{2\epsilon}\tilde{\sigma}_{31} + \iota v_{31}^*(-1 + \sigma_2 + 2\sigma_3) - \iota v_{23}\tilde{\sigma}_{12}^* + \iota v_{12}\tilde{\sigma}_{23}^*. \end{aligned}$$

Celles-ci admettent exactement la même structure que le système lent/rapide de l'Annexe B où x correspond à $(\sigma_2, \tilde{\sigma}_{12})$ et y correspond à $(\sigma_3, \tilde{\sigma}_{23}, \tilde{\sigma}_{31})$. Ainsi, pour les termes dont l'ordre par rapport à ϵ est inférieur ou égal à 1, nous avons l'approximation suivante (utiliser le changement d'échelle $\sigma_3 \mapsto \frac{\bar{\Gamma}_3}{\epsilon}\sigma_3$ pour pouvoir appliquer directement l'approximation de l'Annexe B) :

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{23} &= \frac{2\iota\epsilon}{\bar{\Gamma}_3} [v_{23}^*\sigma_2 + v_{31}\tilde{\sigma}_{12}^*] + O(\epsilon^2) \\ \tilde{\sigma}_{31} &= \frac{2\iota\epsilon}{\bar{\Gamma}_3} [v_{31}^*(\sigma_2 - 1) - v_{23}\tilde{\sigma}_{12}^*] + O(\epsilon^2) \\ \frac{\bar{\Gamma}_3}{\epsilon}\sigma_3 &= \frac{4\epsilon}{\bar{\Gamma}_3} [|v_{31}|^2(1 - \sigma_2) + |v_{23}|^2\sigma_2 + 2\Re(v_{23}v_{31}\tilde{\sigma}_{12}^*)] + O(\epsilon^2). \end{aligned}$$

En prenant les termes d'ordre inférieur ou égal à 1, pour les dynamiques lentes réduites, nous avons (rappelons que $\Gamma_3 = \bar{\Gamma}_3/\epsilon$)

$$\frac{d}{dt}\sigma_2 = -\Gamma_2\sigma_2 + \iota(v_{12}^*\tilde{\sigma}_{12}^* - v_{12}\tilde{\sigma}_{12}) - \frac{4}{\bar{\Gamma}_3} [|v_{23}|^2\sigma_2 + \Re(v_{23}v_{31}\tilde{\sigma}_{12}^*)] \quad (4.1)$$

$$\frac{d}{dt}\tilde{\sigma}_{12} = \iota v_{12}^*(1 - 2\sigma_2) - \frac{\Gamma_2}{2}\tilde{\sigma}_{12} - \frac{2}{\bar{\Gamma}_3} [(|v_{23}|^2 + |v_{31}|^2)\tilde{\sigma}_{12} + v_{23}v_{31}] \quad (4.2)$$

avec la sortie

$$Y = \Gamma_3 \sigma_3 = \frac{4}{\Gamma_3} [|v_{31}|^2(1 - \sigma_2) + |v_{23}|^2 \sigma_2 + 2\Re(v_{23}v_{31}\tilde{\sigma}_{12}^*)] \quad (4.3)$$

et où les contrôles sont les trois amplitudes complexes v_{12} , v_{23} et v_{31} . Rappelons que le modèle lent, ci-dessus, est valable lorsque

$$|v_{12}|, |v_{23}|, |v_{31}|, \Gamma_2 \ll \Gamma_3$$

et

$$\left| \frac{d}{dt} v_{12} \right| \ll |\omega_{12}| |v_{12}|, \quad \left| \frac{d}{dt} v_{23} \right| \ll |\omega_{23}| |v_{23}|, \quad \left| \frac{d}{dt} v_{31} \right| \ll |\omega_{31}| |v_{31}|.$$

Pour conclure, ces calculs justifient le modèle suivant (Γ_3 grand) :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} x_1 &= u_1 x_3 - \frac{\Gamma_2}{2} x_1 \\ \frac{d}{dt} x_2 &= u_2 x_3 - \frac{\Gamma_2}{2} x_1 \\ \frac{d}{dt} x_3 &= -u_1 x_1 - u_2 x_2 - \Gamma_2 (x_3 + 1) \\ y &= v_1 x_1 + v_2 x_2 + v_3 x_3 \end{cases} \quad (4.4)$$

avec

$$\begin{aligned} x_1 + i x_2 &= \tilde{\sigma}_{12}/2, & x_3 &= 2\sigma_2 - 1, & u_1 + i u_2 &= -i v_{12}^*, & v_1 + i v_2 &= v_{23}v_{31} \\ v_3 &= (|v_{23}|^2 - |v_{31}|^2)/2, & y &= \Gamma_3 Y/4 - (|v_{23}|^2 + |v_{31}|^2)/2. \end{aligned}$$

Ce modèle montre comment on peut coupler les dynamiques quantiques de l'état $x = (x_1, x_2, x_3)$ appartenant à la sphère de Bloch (la sphère unité de \mathbb{R}^3) aux entrées classiques $(u_1, u_2) \in \mathbb{R}^2$ et $(v_1, v_2, v_3) \in \mathbb{R}^3$ (amplitudes des modes résonnants du champ) et à une sortie classique y (le nombre moyen de photons émis). Notons l'influence directe des entrées v_i sur la sortie y .

4.2 Un simple régulateur PI

Prenons (4.4) comme le modèle du contrôle, avec $u_2 = v_2 = v_3 = 0$, $v_1 = 1$. Supposons aussi que $\Gamma_2 = 0$: les états 1 et 2 sont libres de décohérence (une sorte d'état noir). Supposons que $x_2 = 0$ (cela est toujours le cas quitte à effectuer une rotation autour de l'axe x_3). Nous avons alors

$$\frac{d}{dt} x_1 = u_1 x_3, \quad \frac{d}{dt} x_3 = -u_1 x_1, \quad y = x_1.$$

L'état (x_1, x_3) évolue sur le cercle \mathbb{S}^1 . Supposons que le but est de stabiliser le système autour de $x_1 = 0$ et $x_3 = 1$ à l'aide du terme de contrôle $u_1 \in [-u^{\max}, u^{\max}]$ ($u^{\max} > 0$).

Ainsi le régulateur (PI) suivant avec les gains $K_p > 0$ et $K_i > 0$

$$\frac{d}{dt}I = \frac{K_i}{K_p}(u_1 - I) \quad \text{avec} \quad u_1 = \begin{cases} -u^{\max}, & \text{si } -K_p y + I < -u^{\max} \\ -K_p y + I, & \text{si } -u^{\max} \leq -K_p y + I \leq u^{\max} \\ u^{\max}, & \text{si } u^{\max} < -K_p y + I \end{cases}$$

assure la stabilisation quasi-globale autour de $(x_1 = 0, x_3 = 1)$. En fait, le système en boucle fermée (un système sur le cylindre $\mathbb{S}^1 \times \mathbb{R}$) admet seulement deux états stationnaires : $(x_1, x_3) = (0, 1)$ avec $I = 0$ est asymptotiquement stable, $(x_1, x_3) = (0, -1)$ avec $I = 0$ est instable. Toutes les trajectoires en boucle fermée différentes de l'état stationnaire instable convergent asymptotiquement et exponentiellement vers l'état stationnaire stable.

À l'exception du fait que le système original évolue sur \mathbb{S}^1 et pas sur \mathbb{R} , ce régulateur PI est l'analogue du régulateur PI classique couramment appliqué pour le système du première ordre $\frac{d}{dt}y = u$ et sa robustesse est bien établie.

4.3 Système de Lindblad lent/rapide

Dans cette section, nous adaptons les calculs de la Section 4.1 lorsqu'à la place des équations de Bloch, une équation maîtresse du type Lindblad est considérée. Nous montrons que le système lent réduit obéit, de même, à une équation maîtresse du type Lindblad avec les opérateurs qui peuvent être déduits directement des opérateurs originaux.

Considérons l'équation maîtresse suivante, pour la matrice densité ρ associée à un système de dimension n :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho &= -\frac{i}{\hbar}[H_0 + u(t)H_1, \rho] + \Gamma\mathcal{D}[Q](\rho), \\ Y &= \Gamma\text{Tr}[Q^\dagger Q\rho]. \end{aligned}$$

Les opérateurs Hermitiens H_0 et H_1 sont, respectivement, l'Hamiltonien libre et l'Hamiltonien d'interaction avec une source cohérente du contrôle $u(t) \in \mathbb{R}$. Pour les opérateurs A et B arbitraires, le super-opérateur \mathcal{D} est défini par

$$\mathcal{D}[A](B) = \frac{1}{2}(2ABA^\dagger - A^\dagger AB - BA^\dagger A).$$

L'opérateur Q modélise la décohérence associée à la mesure Y . $\Gamma > 0$ est une constante de normalisation liée à l'inverse du temps de décohérence associé à la mesure Y . Ainsi Q n'a pas de dimension et nous supposons partout dans cette section que Q est un opérateur de transition de la forme $|g\rangle\langle e|$, où $|g\rangle$ et $|e\rangle$ sont deux états propres de l'Hamiltonien libre H_0 . Bien évidemment, nous avons les deux relations suivantes :

$$Q^2 = 0, \quad Q^\dagger Q = P = |e\rangle\langle e|,$$

où P est l'opérateur de projection sur l'état excité $|e\rangle$.

Les fréquences de transition, $\omega_{ij} = \lambda_i - \lambda_j$ (où les λ_i 's sont les valeurs propres de H_0/\hbar), sont supposées beaucoup plus grandes que la décohérence Γ . Donc nous avons la possibilité d'utiliser l'approximation des champs tournants comme dans la sous-section 4.1.1. Nous considérons la transformation $\rho \mapsto U\rho U^\dagger$, où $U = e^{iH_0t/\hbar}$ est le propagateur de l'évolution libre. D'autre part, nous supposons que le champ de contrôle $u(t)$ est dans le régime résonnant par rapport aux fréquences naturelles du système, et nous modulons les amplitudes $u_{ij}(t)$:

$$u(t) = \sum_{i,j} u_{ij}(t) \sin(\omega_{ij}t).$$

Les amplitudes $u_{ij}(t)$'s sont lentement variables.

Après moyennisation, nous obtenons l'équation maîtresse suivante :

$$\frac{d}{dt}\rho = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \frac{\Gamma}{2} (2Q\rho Q^\dagger - Q^\dagger Q\rho - \rho Q^\dagger Q), \quad Y = \Gamma \text{Tr} [Q^\dagger Q\rho] \quad (4.5)$$

où H correspond aux termes séculaires de uUH_1U^\dagger . Une telle approximation est valable lorsque les amplitudes u_{ij} sont suffisamment petites.

Nous supposons aussi que la relaxation de l'état $|e\rangle$ vers l'état $|g\rangle$, qui aboutit à la détection des photons, est beaucoup plus rapide que les autres dynamiques de l'équation (4.5) (durée de vie atomique courte pour l'état $|e\rangle$). Alors nous pouvons prendre $\Gamma = \bar{\Gamma}/\epsilon$ où ϵ est un petit paramètre positif. Ainsi, dans le repère d'interaction et pour les amplitudes suffisamment petites u_{ij} , nous avons l'équation maîtresse suivante :

$$\frac{d}{dt}\rho = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \frac{\bar{\Gamma}}{2\epsilon} (2Q\rho Q^\dagger - Q^\dagger Q\rho - \rho Q^\dagger Q),$$

où $0 < \epsilon \ll 1$.

Définissons :

$$\begin{aligned} \rho_f &= P\rho + \rho P - P\rho P \\ \rho_s &= (1 - P)\rho(1 - P) + Q\rho Q^\dagger. \end{aligned}$$

Comme $\rho = \rho_s + \rho_f - QP\rho_f P Q^\dagger$, il y a une correspondance bijective entre ρ et (ρ_f, ρ_s) : nous avons une sorte de "changement de variables" pour ρ qui découple la partie lente et la partie rapide de la dynamique, et qui nous propose une "forme standard de Tikhonov" :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_f &= -\frac{\bar{\Gamma}}{2\epsilon}(\rho_f + P\rho_f P) - \frac{i}{\hbar}(P[H, \rho] + [H, \rho]P - P[H, \rho]P), \\ i\hbar \frac{d}{dt}\rho_s &= (1 - P)[H, \rho](1 - P) + Q[H, \rho]Q^\dagger. \end{aligned}$$

Alors ρ_f est associée à la partie rapide des dynamiques et ρ_s représente la partie lente. La partie rapide est asymptotiquement stable puisque $-\frac{\bar{\Gamma}}{2\epsilon}(\rho_f + P\rho_f P)$ définit un super-opérateur défini-négatif sur l'espace des opérateurs Hermitiens :

$$\text{Tr}[-(\rho_f + P\rho_f P)\rho_f] = -(\|\rho_f\|^2 + \|P\rho_f\|^2).$$

Ici nous pouvons appliquer les calculs lent/rapide comme ils sont décrits dans l'Annexe B. En calculant les termes du premier ordre, nous trouvons l'approximation suivante pour ρ_f par rapport à ρ_s :

$$\rho_f = \frac{-2i\epsilon}{\hbar\bar{\Gamma}} (PH\rho_s - \rho_s HP) + O(\epsilon^2).$$

Les dynamiques lentes sont données par :

$$\frac{d}{dt}\rho_s = -\frac{i}{\hbar}[H_s, \rho_s] + 4\epsilon\bar{\Gamma} \left(\bar{Q}\rho_s\bar{Q}^\dagger - \frac{1}{2}\bar{Q}^\dagger\bar{Q}\rho_s - \frac{1}{2}\rho_s\bar{Q}^\dagger\bar{Q} \right) + O(\epsilon^2),$$

où

$$H_s = (1 - P)H(1 - P)$$

et

$$\bar{Q} = \frac{1}{\hbar\bar{\Gamma}}(1 - P)QH(1 - P) \quad , \quad \bar{Q}^\dagger = \frac{1}{\hbar\bar{\Gamma}}(1 - P)HQ^\dagger(1 - P).$$

Notons que, comme Q , l'opérateur \bar{Q} est sans dimension. Cela se passe différemment pour la sortie Y . Nous avons :

$$Y(t) = \frac{\bar{\Gamma}}{\epsilon}\text{Tr}[Q^\dagger Q\rho] = \frac{\bar{\Gamma}}{\epsilon}\text{Tr}[Q^\dagger Q\rho_f] = \frac{-2i}{\hbar}\text{Tr}[P(PH\rho_s - \rho_s HP)] + O(\epsilon).$$

Mais $\text{Tr}[P(PH\rho_s - \rho_s HP)] = 0$. Nous devons prendre en compte les termes d'ordre deux dans les asymptotes de ρ_f par rapport à ϵ . À l'aide de l'Annexe B, des calculs simples mais fastidieux aboutissent à l'approximation naturelle suivante

$$Y(t) = 4\epsilon\bar{\Gamma}\text{Tr}[\bar{Q}^\dagger\bar{Q}\rho_s] + O(\epsilon^2).$$

Mais $\bar{\Gamma}/\epsilon = \Gamma$. Ainsi, nous avons montré que quand Γ est grande (comparée avec $\frac{H}{\hbar}$), l'équation maîtresse lente associée à (4.5) s'écrit

$$\frac{d}{dt}\rho_s = -\frac{i}{\hbar}[H_s, \rho_s] + \frac{2}{\Gamma}(2Q_s\rho_s Q_s^\dagger - Q_s^\dagger Q_s \rho_s - \rho_s Q_s^\dagger Q_s), \quad Y = \frac{2}{\Gamma}\text{Tr}[Q_s Q_s \rho_s]$$

où

$$\rho_s = (1 - P)\rho(1 - P), \quad H_s = (1 - P)H(1 - P), \quad Q_s = (1 - P)Q \left(\frac{H}{\hbar} \right) (1 - P)$$

avec $P = Q^\dagger Q$. Rappelons que H est l'Hamiltonien dans le repère d'interaction avec des modes de laser résonnants et après l'approximation des champs tournants.

Pour conclure, nous remarquons que pour un ensemble de systèmes quantiques indépendants et identiques, et lorsque la décohérence due à la mesure subit des dynamiques rapides par rapport au reste du système, les approximations adiabatiques nous aident à trouver la dynamique lente du système ainsi que la mesure par rapport à cette dynamique lente. Notons que dans ce nouveau système, le terme de décohérence peut être éliminé dans une approximation du premier ordre (Γ grand). Nous obtenons alors un système de la forme

$$\frac{d}{dt}\rho_s = -\frac{i}{\hbar}[H_s, \rho_s],$$

où le contrôle apparaît de façon linéaire dans l'Hamiltonien réduit H_s . Ce système correspond alors à un système bi-linéaire avec les fonctions d'onde comme variables d'état. Nous avons en plus la mesure issue de cette évolution lente donnée par Y . Nous pouvons désormais nous intéresser aux problèmes de contrôle avec mesure continue associés à ce système.

Chapitre 5

Stabilisation pour les modèles stochastiques

Un scénario typique de contrôle par feedback, représentatif des expériences en optique quantique [48], est montré dans la Figure 5.1. Nous espérons contrôler l'état d'un nuage d'atomes, par exemple nous pouvons nous intéresser au contrôle de leur moment angulaire collectif. Pour observer les atomes, nous utilisons un champ de laser et nous mesurons la lumière émise à l'aide d'un détecteur homodyne (une cavité peut être utilisée pour augmenter la puissance d'interaction entre la lumière et les atomes). À partir du signal détecté par observation, un contrôleur contrôle le système via un champ magnétique dépendant du temps. La configuration peut être entièrement décrite par une équation de Schrödinger pour les atomes et le champ, ce qui prend la forme d'une équation différentielle stochastique quantique dans la limite Markovienne. Le laser lui-même contribue aux observations des fluctuations quantiques. Ainsi l'observation peut être considérée comme une observation bruitée de la variable atomique.

Comme nous ne sommes pas autorisés à faire des observations qui ne commutent pas entre elles dans une seule réalisation, toutes les mesures quantiques ne nous fournissent que des informations partielles à propos du système. Le contrôle par feedback d'un système quantique [53, 54] est alors très proche du contrôle stochastique classique lorsque les observations ne sont que partielles [19]. Comme pour le contrôle stochastique classique, nous pouvons utiliser les propriétés de l'espérance conditionnelle pour convertir un problème de contrôle par "output-feedback" en un problème avec observations complètes. L'équation du filtre quantique [17, 21, 23] devient alors pour la densité conditionnelle ρ_t

$$d\rho_t = -i(H_t\rho_t - \rho_t H_t)dt + (c\rho_t c^* - \frac{1}{2}(c^*c\rho_t + \rho_t c^*c))dt + \sqrt{\eta}(c\rho_t + \rho_t c^* - \text{Tr}[(c + c^*)\rho_t]\rho_t)dW_t. \quad (5.1)$$

Cette équation est l'analogie quantique de l'équation de Kushner-Stratonovich pour les filtres non-linéaires [17, 21, 53]. Cette équation de filtre peut alors être considérée comme

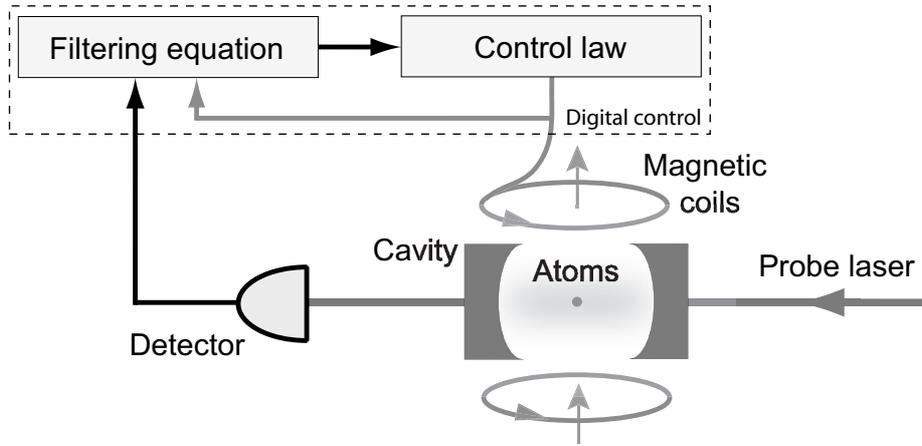


FIG. 5.1 – Un scénario typique de contrôle par feedback en optique quantique. Un laser disperse un nuage atomique dans une cavité optique, et est détecté ensuite. À partir du signal détecté, un contrôleur agit sur le système via un champ magnétique dépendant du temps.

le point de départ pour le problème du feedback quantique. Pour une démonstration rigoureuse d'un principe de séparation, qui nous permet de considérer le problème de contrôle indépendamment du problème d'estimation, nous renvoyons le lecteur à [18, 22]. Introduisons les éléments présents dans le modèle ci-dessus :

- Le processus de Wiener W_t est l'innovation $dW_t = dy_t - \sqrt{\eta} \text{Tr} [(c + c^*)\rho_t] dt$. Ici y_t , le processus d'observation obtenu par le système, est une semi-martingale continue de variation quadratique $\langle y, y \rangle_t = t$.
- $H_t = H_t^*$ est une matrice d'Hamiltonien qui décrit l'action des forces externes sur le système. Nous considérons H_t de la forme $H_t = F + u_t G$ avec $F = F^*$, $G = G^*$ et le contrôle scalaire réel u_t . Ainsi, le contrôle agit sur le système de façon cohérente.
- u_t est un processus scalaire réel borné qui est adapté à $\mathcal{F}_t^y = \sigma(y_s, 0 \leq s \leq t)$, la filtration générée par les observations jusqu'à l'instant t .
- c est une matrice qui détermine le couplage avec le champ externe.
- $0 < \eta \leq 1$ est l'efficacité du détecteur.

Le problème principal que nous étudions dans ce chapitre est la stabilisation de cette équation du filtre (5.1) pour certains systèmes populaires en physique : système du moment angulaire et intrication des états de deux spins.

La stabilisation pour les systèmes de basse dimension a été étudiée dans [53]. Il a été montré que la difficulté principale est due à la symétrie géométrique cachée dans l'espace d'états du système. Beaucoup de choix naturels pour le terme de feedback se sont montrés inefficaces pour la stabilisation du système en boucle fermée : l'ensemble ω -limite contient des points autres que la cible. L'approche de [53] utilise une recherche informatique des champs de contrôle continus qui cassent cette symétrie, stabilisant globalement l'état désiré.

Malheureusement, cette méthode est limitée par le coût des calculs et ne peut être appliquée qu'à des systèmes de basses dimensions. De plus, une démonstration de la stabilité avec des paramètres arbitraires semble être difficile, car la méthode n'est pas analytique.

Ici, nous introduisons une approche différente qui évite les points limites non-voulus en changeant le feedback autour de ces états. L'approche est entièrement analytique et stabilise globalement l'état cible désiré pour une dimension arbitraire N et avec $0 < \eta \leq 1$.

Dans la première Section, nous présentons cette approche sur l'exemple d'un système à deux qubits. Les simulations numériques de cette section nous montrent l'intérêt de ce terme de feedback et son efficacité dans le cadre de l'exemple considéré. Dans la Section 5.2, nous étudions des questions comme l'existence et l'unicité des solutions de l'équation du filtre, la continuité des trajectoires, etc. Dans la Section 5.3 nous considérons le problème de la stabilisation autour d'un état propre d'un moment angulaire et nous démontrons la stabilité globale sous une loi particulière de contrôle. Finalement, nous espérons que les méthodes de la Section 5.3 sont suffisamment flexibles pour être appliquées à une classe très large des scénarios de préparation des états quantiques. Comme exemple, dans la Section 5.4, nous utilisons ces méthodes pour stabiliser les états intriqués de deux spins.

Les résultats de ce chapitre ont été initiés par un séjour de deux mois à Caltech et sont issus d'une collaboration avec R. Van Handel. Ces résultats font l'objet de deux publications en cours : une publication soumise à la revue "SIAM Journal of Applied Mathematics" [88], et l'autre en cours de préparation [89].

5.1 Contrôle par feedback d'un système à deux qubits

Les qubits, i.e. les systèmes quantiques à deux états (ayant un espace de Hilbert de dimension deux), et en particulier les états corrélés (intriqués) de plusieurs qubits, jouent un rôle important pour l'information quantique. Dans cette section, nous considérons le système à deux-qubits qui interagit d'une façon dispersive et symétrique dans la direction z avec un appareil de mesure optique.

Nous commençons par définir les matrices de Pauli

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

et nous définissons la base $\psi_\uparrow = (1 \ 0)^*$ et $\psi_\downarrow = (0 \ 1)^*$ dans \mathbb{C}^2 . Un système de deux qubits vit dans un espace de dimension 4, $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$, avec la base standard $\{\psi_{\uparrow\uparrow} = \psi_\uparrow \otimes \psi_\uparrow, \psi_{\uparrow\downarrow} = \psi_\uparrow \otimes \psi_\downarrow, \psi_{\downarrow\uparrow} = \psi_\downarrow \otimes \psi_\uparrow, \psi_{\downarrow\downarrow} = \psi_\downarrow \otimes \psi_\downarrow\}$. Nous notons par $\sigma_{x,y,z}^1 = \sigma_{x,y,z} \otimes \mathbb{1}$ et $\sigma_{x,y,z}^2 = \mathbb{1} \otimes \sigma_{x,y,z}$ les matrices de Pauli des deux qubits et par $F_{x,y,z} = \sigma_{x,y,z}^1 + \sigma_{x,y,z}^2$ l'opérateur (non-normalisé) du moment angulaire collectif. Nous avons alors l'équation du

filtre quantique suivante [53]

$$d\rho_t = -iu_1[\sigma_y^1, \rho_t]dt - iu_2[\sigma_y^2, \rho_t]dt + (F_z\rho_tF_z - \frac{1}{2}F_z^2\rho_t - \frac{1}{2}\rho_tF_z^2)dt + \sqrt{\eta}(F_z\rho_t + \rho_tF_z - 2\text{Tr}[F_z\rho_t]\rho_t)dw_t \quad (5.2)$$

où u_1 et u_2 sont des contrôles indépendants qui sont des champs magnétiques locaux dans la direction y de chacun des qubits.

Le but principal dans cette Section est de stabiliser le système autour de deux états cibles intéressants :

$$\rho_s = \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)(\langle\uparrow\downarrow| + \langle\downarrow\uparrow|) \quad \text{et} \quad \rho_a = \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)(\langle\uparrow\downarrow| - \langle\downarrow\uparrow|)$$

où ρ_s est symétrique et ρ_a est anti-symétrique.

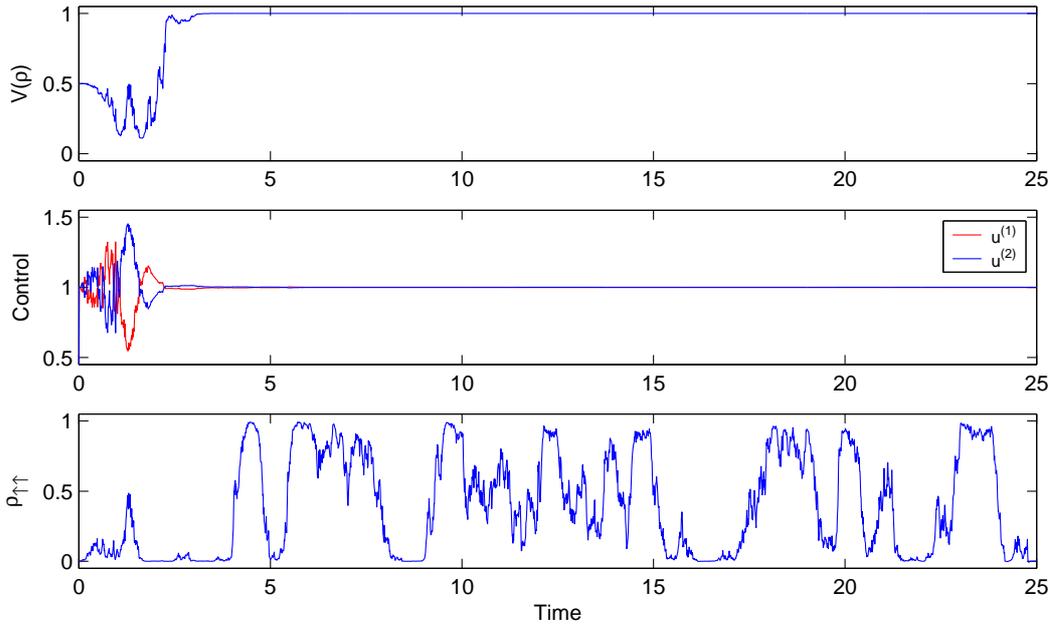


FIG. 5.2 – Une trajectoire simulée de ρ_t avec le contrôle (5.4). Malgré le fait que $V(\rho_t)$ converge, ρ_t est piégé par un attracteur non-fixe (ici $\eta = 0.5$, $\rho_0 = |\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow|$, $\rho_{\uparrow\uparrow} = \langle\uparrow\uparrow|\rho_t|\uparrow\uparrow\rangle$).

Commençons par le cas où l'état cible est l'état anti-symétrique ρ_a . Pour cela, nous considérons la fonction de Lyapounov $V(\rho) = 1 - \text{Tr}[\rho\rho_a]$. Nous avons

$$\frac{d}{dt}\mathbb{E}V(\rho_t) = \mathbb{E}\{u_t^{(1)}\text{Tr}[i[\sigma_y^{(1)}, \rho_t]\rho_a] + u_t^{(2)}\text{Tr}[i[\sigma_y^{(2)}, \rho_t]\rho_a]\}. \quad (5.3)$$

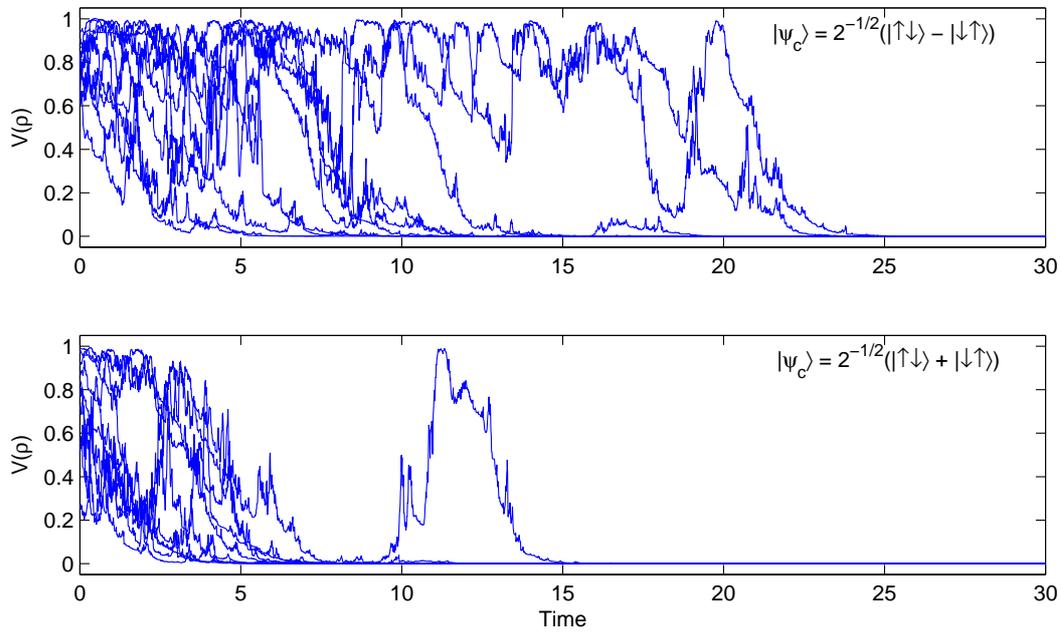


FIG. 5.3 – Les trajectoires simulées pour dix ρ_0 choisis d'une façon aléatoire, avec les lois de contrôle anti-symétrique (au-dessus) et symétrique (au-dessous). Ici $\eta = 0.5$, et $\varepsilon = 0.1$.

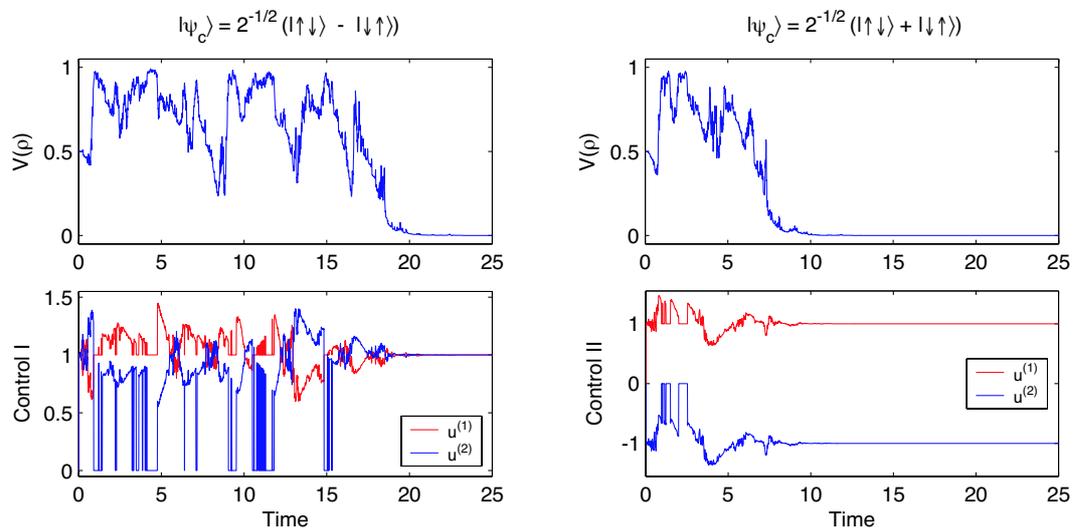


FIG. 5.4 – Une trajectoire typique de $V(\rho_t)$ et les signaux de feedback $u_t^{(1,2)}$ pour les lois de contrôle anti-symétrique (à gauche) et symétrique (à droite). Ici $\eta = 0.5$, $\varepsilon = 0.1$, et $\rho_0 = |\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow|$.

Celle-ci nous suggère un candidat pour le contrôle : $u_t^{(1,2)} = -\text{Tr} \left[i[\sigma_y^{(1,2)}, \rho_t] \rho_a \right]$. Avec cette loi de contrôle, $\mathbb{E}V(\rho_t)$ est clairement décroissante. Cependant, cette loi de contrôle est insuffisante pour le problème de la stabilisation, par exemple avec cette loi l'état $\rho = |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|$ est un point fixe de la dynamique, et donc ne converge pas vers ρ_a .

Pour régler ce problème, nous considérons deux modifications pour la loi de contrôle. Premièrement, notons que le second membre de (5.3) est encore non-positif si on prend la loi

$$u_t^{(1,2)} = 1 - \text{Tr} \left[i[\sigma_y^{(1,2)}, \rho_t] \rho_a \right]. \quad (5.4)$$

Malgré cette amélioration, nous avons seulement garanti que $V(\rho_t)$ est décroissante en moyenne, et pas qu'elle converge vers 0. Ainsi nous avons éliminé les points fixes non-désirés du système, mais par exemple pas la convergence vers un "cycle limite" stochastique admettant une valeur fixe non-nulle pour $V(\rho)$. En fait, de tels attracteurs se produisent avec une certaine probabilité (voir les simulations de la Figure 5.2).

Bien que cela n'apparaisse pas évident, une analyse soignée montre que dans chaque réalisation du système contrôlé, $V(\rho_t)$ converge soit vers zéro (dans le cas où $\rho_t \rightarrow \rho_a$) soit vers un (comme le cas de la Figure 5.2). Il s'agit donc d'éviter l'ensemble de niveau $V = 1$. Nous choisissons les lois de contrôle constantes sur un voisinage de cet ensemble de niveau. Lorsque les opérateurs de contrôleur et de mesure satisfont une certaine condition de contrôlabilité (qui sera clarifiée dans les sections suivantes) ces lois constantes assurent la sortie en temps fini de ce voisinage (une sorte d'ergodicité). Lorsque l'état du système est à l'extérieur de ce voisinage, il sera absorbé par l'état cible avec une certaine probabilité non-nulle. Ainsi nous pouvons espérer un comportement asymptotique convergent pour le système en boucle fermée.

L'idée consiste alors à considérer les lois de feedback suivantes pour (5.4) :

$$u_t^{(1)} = \begin{cases} 1 - \text{Tr} \left[i[\sigma_y^{(1)}, \rho_t] \rho_a \right] & \text{pour } V(\rho_t) \leq 1 - \varepsilon \\ 1 & \text{pour } V(\rho_t) > 1 - \varepsilon \end{cases}$$

$$u_t^{(2)} = \begin{cases} 1 - \text{Tr} \left[i[\sigma_y^{(2)}, \rho_t] \rho_a \right] & \text{pour } V(\rho_t) \leq 1 - \varepsilon \\ 0 & \text{pour } V(\rho_t) > 1 - \varepsilon \end{cases}$$

où $0 < \varepsilon \ll 1$. En cassant les attracteurs non-désirés, nous assurons la convergence vers l'état cible (voir la Figure 5.3).

De même, nous pouvons considérer l'état cible symétrique ρ_s . Une analyse identique à celle du cas anti-symétrique nous conduit vers la loi de contrôle

$$u_t^{(1)} = \begin{cases} 1 - \text{Tr} \left[i[\sigma_y^{(1)}, \rho_t] \rho_s \right] & \text{pour } V(\rho_t) \leq 1 - \varepsilon \\ 1 & \text{pour } V(\rho_t) > 1 - \varepsilon \end{cases}$$

$$u_t^{(2)} = \begin{cases} -1 - \text{Tr} \left[i[\sigma_y^{(2)}, \rho_t] \rho_s \right] & \text{pour } V(\rho_t) \leq 1 - \varepsilon \\ 0 & \text{pour } V(\rho_t) > 1 - \varepsilon \end{cases}$$

où $V(\rho) = 1 - \text{Tr}[\rho\rho_c]$ et $0 < \varepsilon \ll 1$ (voir la Figure 5.3).

Pour les simulations nous avons utilisé une méthode d'Euler stochastique [66] avec un pas de temps de longueur 0.01. Pour chaque trajectoire, nous avons choisi, d'une façon aléatoire, une condition initiale ρ_0 et une suite d'innovation W_t . Comme prévu, toutes les trajectoires sont attirées vers l'état cible, indépendamment de la condition initiale ou de l'innovation aléatoire. Toutefois, le temps de convergence varie d'une trajectoire à l'autre. Nous observons de même des trajectoires qui parcourent des excursions longues avant de converger vers l'état cible. Cet effet a été déjà observé dans [119] et est une conséquence naturelle de notre loi de contrôle.

La Figure 5.4 montre une trajectoire typique d'une telle loi de contrôle. Notons qu'avant de converger, la trajectoire passe plusieurs fois par la zone $V(\rho) > 1 - \varepsilon$. Cependant, il y'a convergence et le contrôle prend sa valeur stationnaire.

Dans les sections suivantes, nous étudierons d'abord la nature bien posée du problème ainsi que les propriétés de la solution dont on va avoir besoin pour la preuve de la convergence. Ensuite nous étudierons la convergence pour les deux cas d'un système de moments angulaires et de l'intrication des états de deux spins.

5.2 Filtres quantiques : les propriétés mathématiques

Cette section a pour sujet l'étude des équations dynamiques pour un système quantique général en boucle fermée et l'établissement de leurs propriétés élémentaires.

Nous considérons les systèmes quantiques de dimension finie $1 < N < \infty$. L'espace d'états d'un tel système est donné par l'ensemble des matrices densités

$$\mathcal{S} = \{\rho \in \mathbb{C}^{N \times N}; \rho = \rho^*, \text{Tr}[\rho] = 1, \rho \geq 0\} \quad (5.5)$$

où ρ^* représente la conjugaison Hermitienne. Les systèmes quantiques de dimension finie sont omniprésents dans la physique quantique contemporaine; un système quantique de dimension $N = 2^n$, par exemple, peut représenter l'état collectif de n qubits dans la configuration de calcul quantique, et $N = 2J + 1$ représente un système de moment angulaire fixé J . La remarque suivante décrit la structure de l'ensemble \mathcal{S} :

Remarque 19. \mathcal{S} est l'enveloppe convexe de $\{\rho \in \mathbb{C}^{N \times N}; \rho = vv^*, v \in \mathbb{C}^N, v^*v = 1\}$.

Dans une première étape nous étudions la nature bien posée du système (5.1). Le terme non-linéaire $\text{Tr}[(c + c^*)\rho_t] \rho_t$ semble être le terme le plus troublant pour une analyse d'existence et unicité de la solution du système (5.1) dans l'ensemble \mathcal{S} . Ce dernier est en fait un terme de normalisation qui assure la conservation de la trace de la matrice densité ρ .

Éliminons, pour l'instant, ce terme non-linéaire de normalisation. Nous avons alors une équation linéaire d'Itô

$$d\tilde{\rho}_t = -i(H_t\tilde{\rho}_t - \tilde{\rho}_tH_t)dt + (c\tilde{\rho}_tc^* - \frac{1}{2}(c^*c\tilde{\rho}_t + \tilde{\rho}_tc^*c))dt + (c\tilde{\rho}_t + \tilde{\rho}_tc^*)dy_t. \quad (5.6)$$

Cette équation admet une solution forte unique, puisqu'elle obéit la condition de Lipschitz (aléatoire) globale [103](page 249-253).

Lemme 4. *L'ensemble des matrices non-nulles non-négatives est p.s. (presque sûrement) invariant pour (5.6).*

Démonstration :

Nous commençons par décomposer $\tilde{\rho}_0$ en une somme de projecteurs sur les états propres, i.e. $\tilde{\rho}_0 = \sum_i \lambda_i v_0^i v_0^{i*}$, $v_0^i \in \mathbb{C}^N$ étant le i 'ième vecteur propre et λ_i la valeur propre associée. Comme $\tilde{\rho}_0$ est non-négative, toutes les valeurs propres λ_i sont non-négatives. Considérons maintenant l'ensemble des équations

$$d\rho_t^i = -i(H_t \rho_t^i - \rho_t^i H_t)dt + (c \rho_t^i c^* - \frac{1}{2}(c^* c \rho_t^i + \rho_t^i c^* c))dt + (c \rho_t^i + \rho_t^i c^*)dW_t' \quad (5.7)$$

avec $\rho_0^i = v_0^i v_0^{i*}$. Ici nous avons étendu l'espace de probabilité pour qu'il admette un processus de Wiener \hat{W}_t indépendant de y_t , et $W_t' = \sqrt{\eta}y_t + \sqrt{1-\eta}\hat{W}_t$. Le processus $\tilde{\rho}_t$ est alors équivalent en loi à $\mathbb{E}[\rho_t' | \mathcal{F}_t^y]$, où $\rho_t' = \sum_i \lambda_i \rho_t^i$.

Maintenant notons que la règle d'Itô [98] implique que la solution de l'ensemble des équations

$$dv_t^i = -iH_t v_t^i dt - \frac{1}{2}c^* c v_t^i dt + c v_t^i dW_t' \quad v_t^i \in \mathbb{C}^N, \quad (5.8)$$

satisfait $\rho_t^i = v_t^i v_t^{i*}$.

D'après [103], page 326, nous savons que $v_t^i = U_t v_0^i$ où la matrice aléatoire U_t est p.s. inversible pour tout temps t . Ainsi, p.s. $v_t^i \neq 0$ pour tout t sauf si $v_0^i = 0$. Donc clairement ρ_t' est p.s. une matrice non-nulle non-négative pour tout temps t , ce qui termine la preuve du Lemme 4. \square

Finalement, nous avons

Théorème 13. *L'équation (5.1) admet une solution forte unique $\rho_t = \tilde{\rho}_t / \text{Tr}[\tilde{\rho}_t]$ dans \mathcal{S} .*

Clairement cela doit être satisfait si (5.1) propage une densité.

Démonstration :

Comme l'ensemble des matrices non-nulles non-négatives est invariant pour $\tilde{\rho}_t$, cela implique en particulier que p.s. $\text{Tr}[\tilde{\rho}_t] > 0$ pour tout t . Ainsi le résultat découle directement de l'application de la règle d'Itô sur (5.6), et du fait que si $M = \sum_i \lambda_i v_i v_i^*$ est une matrice non-nulle non-négative, alors $M / \text{Tr}[M] = \sum_i (\lambda_i / \sum_j \lambda_j) v_i v_i^* \in \mathcal{S}$. \square

Après avoir établi la nature bien posée du système dans l'ensemble \mathcal{S} , nous nous concentrons sur les différentes propriétés mathématiques de la solution nécessaire à l'analyse de convergence.

Théorème 14. *Nous avons l'estimation uniforme suivante pour (5.1) :*

$$\mathbb{P} \left(\sup_{0 \leq \delta \leq \Delta} \|\rho_{t+\delta} - \rho_t\| > \epsilon \right) \leq C\Delta(1 + \Delta) \quad \forall \epsilon > 0 \quad (5.9)$$

où $0 < C < \infty$ dépend seulement de ϵ et $\|\cdot\|$ est la norme de Frobenius ($\|A\|^2 = (A, A)$) avec le produit scalaire $(A, B) = \text{Tr}[A^*B]$. Ainsi la solution de (5.1) est stochastiquement continue en t et ρ_0 .

Démonstration :

Prenons $\rho_t = \rho_0 + \Phi_t + \Xi_t$ où

$$\Phi_t = \int_0^t [-i(H_s \rho_s - \rho_s H_s) + (c \rho_s c^* - \frac{1}{2}(c^* c \rho_s + \rho_s c^* c))] ds \quad (5.10)$$

$$\Xi_t = \int_0^t \sqrt{\eta} (c \rho_s + \rho_s c^* - \text{Tr}[(c + c^*) \rho_s] \rho_s) dW_s. \quad (5.11)$$

Pour Ξ_t nous avons l'estimation suivante ([5], page 81)

$$\mathbb{E} \left(\sup_{0 \leq \delta \leq \Delta} \|\Xi_{t+\delta} - \Xi_t\|^2 \right) \leq 4\eta \int_t^{t+\Delta} \mathbb{E} \|c \rho_s + \rho_s c^* - \text{Tr}[(c + c^*) \rho_s] \rho_s\|^2 ds \quad (5.12)$$

Comme le terme intégré est borné, cette expression est bornée par $C_1 \Delta$ pour une constante positive $C_1 < \infty$. Pour Φ_t nous pouvons écrire

$$\mathbb{E} \left(\sup_{0 \leq \delta \leq \Delta} \|\Phi_{t+\delta} - \Phi_t\|^2 \right) \leq \mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq \delta \leq \Delta} \int_t^{t+\delta} \|G_s\| ds \right]^2 = \mathbb{E} \left[\int_t^{t+\delta} \|G_s\| ds \right]^2 \quad (5.13)$$

où G_s signifie le terme intégré dans (5.10). Nous pouvons estimer cette expression par $C_2 \Delta^2$ avec $C_2 < \infty$, car $\|G_s\|$ est bornée. En utilisant $\|A + B\|^2 \leq 2(\|A\|^2 + \|B\|^2)$ nous pouvons écrire

$$\sup_{0 \leq \delta \leq \Delta} \|\rho_{t+\delta} - \rho_t\|^2 \leq 2 \left(\sup_{0 \leq \delta \leq \Delta} \|\Phi_{t+\delta} - \Phi_t\|^2 + \sup_{0 \leq \delta \leq \Delta} \|\Xi_{t+\delta} - \Xi_t\|^2 \right). \quad (5.14)$$

Enfin, via l'inégalité de Tchebychev

$$\mathbb{P} \left(\sup_{0 \leq \delta \leq \Delta} \|\rho_{t+\delta} - \rho_t\| > \epsilon \right) \leq \frac{1}{\epsilon^2} \mathbb{E} \left(\sup_{0 \leq \delta \leq \Delta} \|\rho_{t+\delta} - \rho_t\|^2 \right) \leq \frac{2C_1 \Delta + 2C_2 \Delta^2}{\epsilon^2} \quad (5.15)$$

ce qui termine la preuve. \square

Théorème 15. *Les trajectoires du système (5.1) sont presque sûrement continues en t .*

Démonstration :

De façon similaire à la démonstration précédente, prenons $\rho_t = \rho_0 + \Phi_t + \Xi_t$. Notons que le processus Φ_t est différentiable par rapport à t et que sa dérivée est bornée puisque \mathcal{S} est compacte.

Un tel processus Φ_t est Lipschitz, et alors uniformément continu par rapport à t . Ensuite, nous appliquons l'estimation suivante (voir par exemple [5], page 81) : pour tout $0 \leq s < t < \infty$ et $p > 2$

$$\mathbb{E} \left\| \int_s^t K_\sigma dW_\sigma \right\|^p \leq \left[\frac{p(p-1)}{2} \right]^{p/2} (t-s)^{(p-2)/2} \int_s^t \mathbb{E} \|K_\sigma\|^p d\sigma \quad (5.16)$$

où K_σ est le terme intégré dans (5.11). Ainsi nous obtenons

$$\mathbb{E} \|\Xi_t - \Xi_s\|^p \leq C \left[\frac{p(p-1)}{2} \right]^{p/2} (t-s)^{p/2} \quad (5.17)$$

où C est une constante positive qui domine la norme Frobenius $\|\cdot\|$ du terme intégré au second membre de (5.17), et $C < \infty$ car \mathcal{S} est compacte. Conjointement à une version du Théorème de Kolmogorov-Čentsov (Lemma 2.3 dans [84]), cela implique que pour tout γ avec $0 < \gamma < (p-2)/2p$, les trajectoires de $\Xi(t)$ peuvent être choisies localement mais uniformément Hölder continues d'ordre γ . Comme $\rho_t = \rho_0 + \Phi_t + \Xi_t$ nous avons le résultat voulu. \square

Nous nous restreignons maintenant au cas particulier suivant :

– $u_t = u(\rho_t)$ avec $u \in C^1(\mathcal{S}, \mathbb{R})$.

Pour ce cas de feedback, nous pouvons démontrer plusieurs propriétés importantes pour les solutions. Dans la suite, nous allons noter par $\phi_t(\rho, u)$, la solution de (5.1) à l'instant t avec le contrôle $u_t = u(\rho_t)$ et la condition initiale $\rho_0 = \rho \in \mathcal{S}$.

Théorème 16. *Si $V(\rho)$ est continue, alors $\mathbb{E}V(\phi_t(\rho, u))$ est continue en ρ ; i.e., la diffusion (5.1) est Feller continue.*

Démonstration :

Supposons $\{\rho^n \in \mathcal{S}\}$ une séquence de points convergente vers $\rho^\infty \in \mathcal{S}$. Prenons $\rho_t^n = \phi_t(\rho^n, u)$ et $\rho_t^\infty = \phi_t(\rho^\infty, u)$. Tout d'abord, nous allons démontrer que

$$\mathbb{E} \|\rho_t^n - \rho_t^\infty\|^2 \rightarrow 0 \quad \text{lorsque } n \rightarrow \infty. \quad (5.18)$$

Nous écrivons $\delta_t^n = \rho_t^n - \rho_t^\infty$. En utilisant la règle d'Itô, nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \|\delta_t^n\|^2 &= \|\delta_0^n\|^2 + \int_0^t 2\mathbb{E} [\text{Tr} [(i[\rho_s^n, H(\rho_s^n)] - i[\rho_s^\infty, H(\rho_s^\infty)])\delta_s^n] + \text{Tr} [c\delta_s^n c^* \delta_s^n - c^* c (\delta_s^n)^2]] ds \\ &\quad + \int_0^t \eta \mathbb{E} \text{Tr} [(c\delta_s^n + \delta_s^n c^* - \text{Tr} [(c + c^*)\rho_s^n] \rho_s^n + \text{Tr} [(c + c^*)\rho_s^\infty] \rho_s^\infty)^2] ds \end{aligned} \quad (5.19)$$

où $[A, B] = AB - BA$. Essayons d'estimer ces trois termes. Nous avons

$$\begin{aligned} \text{Tr} [c^* c (\delta_t^n)^2] &= \|c\delta_t^n\|^2 \leq C_1 \|\delta_t^n\|^2 \\ \text{Tr} [c\delta_t^n c^* \delta_t^n] &= (\delta_t^n c, c\delta_t^n) \leq \|\delta_t^n c\| \|c\delta_t^n\| \leq C_2 \|\delta_t^n\|^2 \end{aligned} \quad (5.20)$$

où nous avons utilisé l'inégalité de Cauchy-Schwartz et le fait que tous les opérateurs sont bornés. Ensuite

$$\mathrm{Tr} [(i[\rho_t^n, H(\rho_t^n)] - i[\rho_t^\infty, H(\rho_t^\infty)]) \delta_t^n] \leq \|i[\rho_t^n, H(\rho_t^n)] - i[\rho_t^\infty, H(\rho_t^\infty)]\| \|\delta_t^n\|. \quad (5.21)$$

Maintenant, notons que $S(\rho) = i[\rho, H(\rho)] = i[\rho, F + u(\rho)G]$ est C^1 par rapport aux éléments de la matrice ρ , et ses dérivées sont bornées car \mathcal{S} est compacte. Ainsi $S(\rho)$ est Lipschitz continue, et nous avons

$$\|S(\rho_t^n) - S(\rho_t^\infty)\| \leq C_3 \|\rho_t^n - \rho_t^\infty\| = C_3 \|\delta_t^n\|, \quad (5.22)$$

d'où

$$\mathrm{Tr} [(i[\rho_t^n, H(\rho_t^n)] - i[\rho_t^\infty, H(\rho_t^\infty)]) \delta_t^n] \leq C_3 \|\delta_t^n\|^2. \quad (5.23)$$

Finalement, nous avons $\|c\delta_t^n + \delta_t^n c^*\| \leq C_4 \|\delta_t^n\|$ et un argument similaire au précédent implique

$$\|\mathrm{Tr} [(c + c^*)\rho_t^n] \rho_t^n - \mathrm{Tr} [(c + c^*)\rho_t^\infty] \rho_t^\infty\| \leq C_5 \|\delta_t^n\|^2. \quad (5.24)$$

Maintenant nous pouvons utiliser $\|A + B\|^2 \leq \|A\|^2 + 2\|A\| \|B\| + \|B\|^2$ pour estimer le dernier terme dans (5.19) par $C_6 \|\delta_t^n\|^2$. Toutes ces inégalités, ensemble, impliquent

$$\mathbb{E} \|\delta_t^n\|^2 \leq \|\delta_0^n\|^2 + C \int_0^t \mathbb{E} \|\delta_s^n\|^2 ds \quad (5.25)$$

et alors à l'aide du Lemme de Gronwall

$$\mathbb{E} \|\delta_t^n\|^2 \leq e^{Ct} \|\delta_0^n\|^2 = e^{Ct} \|\rho^n - \rho^\infty\|^2. \quad (5.26)$$

Comme le temps t est fixé, la relation (5.18) s'en suit.

Nous avons montré que $\rho_t^n \rightarrow \rho_t^\infty$ lorsque $n \rightarrow \infty$, ce qui implique la convergence en probabilité. Mais alors pour toute fonction continue V , $V(\rho_t^n) \rightarrow V(\rho_t^\infty)$ en probabilité ([49], page 60). Comme \mathcal{S} est compacte, V est bornée et alors nous avons

$$\mathbb{E}V(\rho_t^\infty) = \mathbb{E}[\mathbb{P}\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} V(\rho_t^n)] = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}V(\rho_t^n) \quad (5.27)$$

par le Théorème de la convergence dominée ([49], page 72). Comme ce résultat est valable pour toutes les séquences convergentes ρ^n , le résultat s'en suit. \square

Théorème 17. $\phi_t(\rho, u)$ est un processus Markovien fort sur \mathcal{S} .

Démonstration : La preuve de la propriété de Markov dans [98] (page 109-110), s'adapte à notre cas. Ainsi la propriété forte de Markov découle de la Feller continuité [73]. \square

Théorème 18. Prenons τ le premier temps de sortie de ρ_t d'un ensemble ouvert $Q \subset \mathcal{S}$ et considérons le processus arrêté $\rho_t^Q = \phi_{t \wedge \tau}(\rho, u)$. Alors ρ_t^Q est aussi un processus Markovien fort dans \mathcal{S} . De plus, pour V telle que $\mathcal{L}V$ existe et est continue, nous avons $\mathcal{L}_Q V(x) = \mathcal{L}V(x)$ si $x \in Q$ et $\mathcal{L}_Q V(x) = 0$ sinon. Ici, \mathcal{L} (resp. \mathcal{L}_Q) est l'opérateur infinitésimal faible associé à $\phi_t(\rho, u)$ (resp. $\phi_t^Q(\rho, u)$).

Démonstration : Cela découle de [73], page 11-12, et le Théorème 14.

5.3 Systèmes du moment angulaire

Dans cette section, nous considérons un système quantique de moment angulaire fixé J ($2J \in \mathbb{N}$), par exemple un ensemble atomique, qui est détecté à l'aide d'un appareil de mesure optique dispersif [54]. Après conditionnement, un tel système est décrit par une équation de la forme (5.1) où

- La dimension de l'espace de Hilbert $N = 2J + 1$;
- $c = \beta F_z$, $F = 0$ et $G = \gamma F_y$ avec $\beta, \gamma > 0$.

Ici F_y et F_z sont des opérateurs (auto-adjoints) de moment angulaire définis par la suite. Prenons $\{\psi_k : k = 0, \dots, 2J\}$ la base standard de \mathbb{C}^N , i.e. ψ_i est le vecteur avec un seul élément non-nul étant le i 'ième $\psi_i^i = 1$. Alors [86]

$$\begin{aligned} F_y \psi_k &= ic_{k-J} \psi_{k+1} - ic_{J-k} \psi_{k-1} \\ F_z \psi_k &= (k - J) \psi_k \end{aligned} \quad (5.28)$$

où $c_m = \frac{1}{2} \sqrt{(J-m)(J+m+1)}$. Sans perdre de la généralité, nous pouvons choisir $\beta = \gamma = 1$, car en changeant les échelles de temps et de u_t , le choix de β et γ devient arbitraire.

Commençons par étudier le comportement de la dynamique de l'équation,

$$d\rho_t = -iu_t [F_y, \rho_t] dt - \frac{1}{2} [F_z, [F_z, \rho_t]] dt + \sqrt{\eta} (F_z \rho_t + \rho_t F_z - 2\text{Tr}[F_z \rho_t] \rho_t) dW_t \quad (5.29)$$

où le feedback $u_t = 0$.

Théorème 19. *Pour tout $\rho_0 \in \mathcal{S}$, la solution ρ_t de (5.29) avec $u_t = 0$ converge p.s. vers un élément de $\{\psi_m \psi_m^* ; m = 0, \dots, 2J\}$, lorsque $t \rightarrow \infty$.*

Démonstration :

Considérons $V_t = \text{Tr}[F_z^2 \rho] - (\text{Tr}[F_z \rho])^2$. Nous avons

$$\mathbb{E}V_t = V_0 - 4\eta \int_0^t \mathbb{E}V_s^2 ds.$$

Maintenant, notons que $V_t > 0$ presque sûrement. Ainsi

$$4\eta \int_0^t \mathbb{E}V_s^2 ds = V_0 - \mathbb{E}V_t \leq V_0 < \infty.$$

Mais alors, nous avons

$$\mathbb{E} \int_0^\infty V_s^2 ds < \infty \quad \Rightarrow \quad \int_0^\infty V_s^2 ds < \infty \quad \text{p.s.}$$

et comme les trajectoires de V_t sont p.s. uniformément continues (Théorème 15), cela implique $V_t \rightarrow 0$ p.s. lorsque $t \rightarrow \infty$. Mais les seuls états ρ satisfaisants $\text{Tr}[F_z^2 \rho] - (\text{Tr}[F_z \rho])^2 = 0$ sont les éléments de $\{\psi_m \psi_m^* ; m = 0, \dots, 2J\}$. \square

Le but principal de cette section est de trouver un terme de feedback qui stabilise (5.29), globalement autour de la solution d'équilibre $(\rho_t \equiv \rho_f, u \equiv 0)$, où nous avons choisi l'état cible $\rho_f = v_f v_f^*$ parmi les états $\psi_m \psi_m^*$.

Le résultat principal de cette section est le suivant :

Théorème 20. *Considérons le système (5.29), évoluant dans l'ensemble \mathcal{S} . Prenons $\rho_f = v_f v_f^*$ où v_f est un élément de $\{\psi_m; m = 0, \dots, 2J\}$, et supposons $\gamma > 0$. Considérons le contrôle suivant :*

1. $u_t = -\text{Tr}[i[F_y, \rho_t]\rho_f]$ si $\text{Tr}[\rho_t \rho_f] \geq \gamma$;
2. $u_t = 1$ si $\text{Tr}[\rho_t \rho_f] \leq \gamma/2$;
3. si $\rho_t \in \mathcal{B} = \{\rho : \gamma/2 < \text{Tr}[\rho \rho_f] < \gamma\}$, alors $u_t = -\text{Tr}[i[F_y, \rho_t]\rho_f]$ si la dernière entrée de ρ_t dans l'ensemble \mathcal{B} est via la frontière $\text{Tr}[\rho \rho_f] = \gamma$, et $u_t = 1$ sinon.

Alors $\exists \gamma > 0$ t.q. u_t stabilise (5.29), globalement autour de ρ_f et $\mathbb{E}\rho_t \rightarrow \rho_f$ lorsque $t \rightarrow \infty$.

Remarque 20. *Remarquons que par rapport à la méthode présentée dans la section précédente, nous avons ajouté une couche intermédiaire pour la loi de feedback qui consiste à un comportement hystérésis. Nous avons une sorte de clé qui change de position lorsque le système croise les frontières de cette couche intermédiaire dans les directions appropriées. Cette clé nous dit quelle loi de feedback doit être active à chaque moment. Pour des raisons techniques qui seront présentées au cours de la démonstration, cette couche intermédiaire doit avoir un rayon non-nul. Mais néanmoins, les simulations numériques montrent que même sans aucune couche additionnelle le résultat doit être valable. La démonstration de ce dernier point pourra faire l'objet de recherches futures.*

Démonstration :

Considérons la fonction non-négative

$$V(\rho) = 1 - \text{Tr}[\rho \rho_f] : \mathcal{S} \rightarrow [0, 1],$$

et pour tout $\alpha \in [0, 1]$, définissons l'ensemble de niveau

$$\mathcal{S}_\alpha = \{\rho \in \mathcal{S} : V(\rho) = \alpha\}.$$

En outre, nous définissons les ensembles suivants

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{>\alpha} &= \{\rho \in \mathcal{S} : \alpha < V(\rho) \leq 1\}, \\ \mathcal{S}_{\geq\alpha} &= \{\rho \in \mathcal{S} : \alpha \leq V(\rho) \leq 1\}, \\ \mathcal{S}_{<\alpha} &= \{\rho \in \mathcal{S} : 0 \leq V(\rho) < \alpha\}, \\ \mathcal{S}_{\leq\alpha} &= \{\rho \in \mathcal{S} : 0 \leq V(\rho) \leq \alpha\}. \end{aligned}$$

La preuve du Théorème 20 se fait en quatre étapes :

1. Dans la première étape, nous montrons que lorsque l'état initial est sur l'ensemble de niveau \mathcal{S}_1 , le champ de contrôle $u \equiv 1$ assure la sortie des trajectoires (au moins) en moyenne de cet ensemble de niveau \mathcal{S}_1 .
2. Deuxièmement, nous utilisons le résultat de l'étape 1 pour montrer l'existence d'un $\gamma > 0$ tel que, pour l'état initial dans l'ensemble $\mathcal{S}_{>1-\gamma}$ (le champ de contrôle est pris égal à 1 ($u = 1$) avant la première sortie de cet ensemble), la valeur moyenne du premier temps de sortie prend une valeur finie. Alors quand les trajectoires du système prennent leurs états initiaux dans l'ensemble $\mathcal{S}_{>1-\gamma}$, elles sortent de cet ensemble dans un temps fini avec la probabilité 1.
3. Dans la troisième étape, nous montrons que pour l'état initial dans l'ensemble $\mathcal{S}_{\leq 1-\gamma}$ (le contrôle est donné par la loi de feedback $u(t) = -\text{Tr}[i[F_y, \rho_t]\rho_f]$ avant la première sortie de l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$), les trajectoires du système ne sortent jamais de l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$ avec une certaine probabilité uniformément supérieure à une valeur fixe strictement positive. De plus, nous montrons que presque toutes les trajectoires restantes à l'intérieur de l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$, convergent vers le point d'équilibre ρ_f avec la probabilité 1.
4. Finalement dans la quatrième étape, nous combinons les résultats de la deuxième et de la troisième étape pour montrer que les trajectoires du système convergent vers l'état d'équilibre ρ_f avec la probabilité 1.

Étape 1 :

Prenons une constante de temps $T > 0$ et définissons la fonction non-négative

$$\chi(\rho) = \min_{t \in [0, T]} \mathbb{E}V(\phi_t(\rho, 1)), \quad \rho \in \mathcal{S}$$

où $\phi_t(\rho, 1)$ représente le flot de (5.29) avec $u(t) \equiv 1$ et la condition initiale $\rho_0 = \rho$.

Cette première étape a pour objet de montrer le résultat suivant :

Lemme 5.

$$\chi(\rho) < 1 \quad \forall \rho \in \mathcal{S}_1.$$

Pour démontrer ce lemme, nous montrons d'abord le résultat déterministe suivant :

Lemme 6. *Considérons l'équation différentielle déterministe*

$$\frac{d}{dt}v_t = (-iF_y - F_z^2 + CF_z)v_t, \quad v_t|_{t=0} = v_0 \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}. \quad (5.30)$$

Pour une constante $C \gg 1$ suffisamment grande, la solution v_t de (5.30) sort de l'ensemble $\{v : \langle v, v_f \rangle = 0\}$ dans l'intervalle $[0, T]$, i.e. il existe $t \in [0, T]$ tel que $\langle v_t, v_f \rangle \neq 0$.

Démonstration du Lemme 6 :

Les matrices F_z et F_y ont les formes suivantes

$$F_z = \begin{pmatrix} * & & & \\ & * & & \\ & & \ddots & \\ & & & * \\ 0 & & & & * \end{pmatrix}, \quad F_y = \begin{pmatrix} 0 & * & & & 0 \\ * & 0 & * & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & * & 0 & * \\ 0 & & & * & 0 \end{pmatrix}$$

où les éléments diagonaux de la matrice F_z sont tous différents (spectre non-dégénéré) et les éléments sur-diagonaux et sous-diagonaux de F_y sont tous non-nuls.

Pour les constantes κ suffisamment grandes, la matrice

$$A = -iF_y - F_z^2 + \kappa F_z$$

admet aussi des valeurs propres distinctes (théorie de perturbations non-dégénérées [32]).

Pour $k \in \{1, \dots, N\}$ définissons les matrices :

$$A_{k-1} = [A_{ij}]_{1 \leq i, j \leq k-1}, \quad \tilde{A}_{k+1} = [A_{ij}]_{k+1 \leq i, j \leq N}.$$

Le fait que les matrices $[(F_z)_{ij}]_{1 \leq i, j \leq k-1}$ et $[(F_z)_{ij}]_{k+1 \leq i, j \leq N}$ aient des valeurs propres différentes, conjointement avec la théorie des perturbations non-dégénérées, implique que pour κ suffisamment grand les matrices A_{k-1} et \tilde{A}_{k+1} admettent aussi des spectres disjoints.

Supposons que la solution de

$$\dot{v} = Av, \quad v|_{t=0} = v_0$$

ne quitte pas l'ensemble $\{v : \langle v, v_f \rangle = 0\}$ pour $t \in [0, T]$. Alors, en particulier

$$\frac{d^n}{dt^n} \langle v, v_f \rangle |_{t=0} = \langle A^n v_0, v_f \rangle = 0 \quad n = 0, 1, \dots$$

La matrice A est diagonalisable car elle a des valeurs propres distinctes : $A = PDP^{-1}$. Donc

$$\langle D^n \tilde{v}_0 | \tilde{v}_f \rangle = 0 \quad n = 0, 1, \dots \quad (5.31)$$

où $\tilde{v}_0 = P^{-1}v_0 \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$ et $\tilde{v}_f = P^*v_f \in \mathbb{C}^N$. L'équation (5.31) implique

$$M\tilde{v}_0 = 0$$

où

$$M = \begin{pmatrix} (\tilde{v}_f)_1 & \dots & (\tilde{v}_f)_N \\ (\tilde{v}_f)_1 D_{11}^* & \dots & (\tilde{v}_f)_N D_{NN}^* \\ (\tilde{v}_f)_1 D_{11}^{*2} & \dots & (\tilde{v}_f)_N D_{NN}^{*2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ (\tilde{v}_f)_1 D_{11}^{*(N-1)} & \dots & (\tilde{v}_f)_N D_{NN}^{*(N-1)} \end{pmatrix}, \quad * \text{ signifie le complexe conjugué.}$$

Le déterminant de la matrice de Vandermonde est donné par

$$\det M = (\tilde{v}_f)_1 \dots (\tilde{v}_f)_N \prod_{i>j} (D_i i^* - D_j j^*).$$

Comme la matrice A admet des valeurs propres distinctes, tous les éléments $D_{11}, D_{22}, \dots, D_{NN}$ sont différents. Si on montre que tous les coefficients du vecteur \tilde{v}_f sont non-nuls, alors la matrice M sera une matrice inversible. Ainsi la seule valeur possible pour \tilde{v}_0 sera 0, ce qui est en contradiction avec $\tilde{v}_0 \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$, et alors la preuve du Lemme 6 sera terminée.

Essayons alors de montrer que cette proposition est vraie et que tous les coefficients du vecteur \tilde{v}_f sont non-nuls. Mais

$$(\tilde{v}_f)_k = (P^* v_f)_k = P_{fk}^*.$$

Donc il suffit de montrer que les vecteurs propres de la matrice A ont des coefficients non-nuls. Supposons qu'un vecteur propre Ξ de A admette un coefficient nul :

$$A\chi = \lambda\Xi \quad , \quad \Xi_k = 0 \quad \text{pour un certain } k \in \{1, \dots, N\}.$$

Définissons $\chi_{k-1} = [\Xi_j]_{j=1, \dots, k-1}$ et $\tilde{\chi}_{k+1} = [\Xi_j]_{j=k+1, \dots, N}$. Alors, un calcul simple montre que, grâce à la structure particulière de la matrice A :

$$A_{k-1} \chi_{k-1} = \lambda \chi_{k-1} \quad \text{et} \quad \tilde{A}_{k+1} \tilde{\chi}_{k+1} = \lambda \tilde{\chi}_{k+1}.$$

Mais l'on sait que A_{k-1} et \tilde{A}_{k+1} admettent des spectres disjoints et donc

$$\text{soit } \chi_{k-1} = 0 \quad \text{soit } \tilde{\chi}_{k+1} = 0.$$

Considérons le cas où $\chi_{k-1} = 0$ (le deuxième cas peut être traité de la même façon) :

$$\Xi_1 = \Xi_2 = \dots = \Xi_k = 0.$$

Supposons $j > k$ le premier coefficient non-nul de Ξ :

$$\Xi_1 = \Xi_2 = \dots = \Xi_{j-1} = 0 \quad \text{et} \quad \Xi_j \neq 0. \quad (5.32)$$

Comme $A\Xi = \lambda\Xi$, nous avons

$$0 = \lambda\Xi_{j-1} = A_{j-1, j-2} \Xi_{j-2} + A_{j-1, j-1} \Xi_{j-1} + A_{j-1, j} \Xi_j = A_{j-1, j} \Xi_j = -i(F_y)_{j-1, j} \Xi_j.$$

Étant donné que $(F_y)_{j-1, j} \neq 0$, cette relation implique que $\Xi_j = 0$. Celle-ci bien évidemment est en contradiction avec (5.32) et alors Ξ n'admet pas de coefficient nul, ce qui termine la preuve du Lemme 6. \square

Démonstration du Lemme 5 :

Nous commençons par re-formuler le problème comme nous le faisons dans la preuve du Lemme 4. Nous pouvons écrire $\phi_t(\rho, 1) = \tilde{\rho}_t / \text{Tr}[\tilde{\rho}_t]$ avec $\tilde{\rho}_t = \sum_i \lambda_i \mathbb{E}[v_t^i v_t^{i*} | \mathcal{F}_t^y]$, où les λ_i sont des poids convexes et les v_t^i sont donnés par les équations

$$dv_t^i = -iF_y v_t^i dt - \frac{1}{2} F_z^2 v_t^i dt + F_z v_t^i dW_t', \quad v_0^i \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}. \quad (5.33)$$

Notons que $\mathbb{E}\text{Tr}[\phi_t(\rho, 1)\rho_f] = 0$ si et seulement si $\mathbb{E}\text{Tr}[\tilde{\rho}_t \rho_f] = \sum_i \lambda_i \mathbb{E}[v_t^{i*} \rho_f v_t^i] = 0$. Mais comme $v_t^{i*} \rho_f v_t^i \geq 0$ p.s., nous obtenons $\mathbb{E}V(\phi_t(\rho, 1)) = 1$ si et seulement si $\langle v_t^i, v_f \rangle = 0$ p.s. pour tout t .

Pour démontrer l'assertion du lemme, il suffit de montrer qu'il existe $t \in [0, T]$ tel que $\mathbb{E}V(\phi_t(\rho, 1)) < 1$. Donc il suffit de montrer que

$$\exists t \in [0, T] \quad \text{t.q.} \quad \mathbb{P}(\langle v_t, v_f \rangle \neq 0) > 0 \quad (5.34)$$

où v_t est la solution d'une équation de la forme (5.33). À cette fin, nous utilisons le Théorème de support, Théorème 27 de l'Annexe D, avec le Lemme 6.

Pour appliquer le Théorème de support, nous devons d'abord nous occuper de deux questions préliminaires. Premièrement, le Théorème de support dans son format du Théorème 27 doit être appliqué aux équations différentielles stochastiques avec un processus de Wiener comme bruit, tandis que le bruit W_t' de l'équation (5.33) est un processus de Wiener avec une dérive (bornée). Toutefois, en utilisant le Théorème de Girsanov, nous pouvons trouver une nouvelle mesure \mathbb{Q} qui est équivalente avec \mathbb{P} , telle que W_t' est un processus de Wiener pour \mathbb{Q} dans l'intervalle $[0, T]$. Mais comme ces deux mesures sont équivalentes,

$$\exists t \in [0, T] \quad \text{t.q.} \quad \mathbb{Q}(\langle v_t, v_f \rangle \neq 0) > 0 \quad (5.35)$$

implique (5.34). Deuxièmement, le Théorème de support ne peut être appliqué qu'à une équation de la forme Stratonovich; cependant, nous pouvons facilement trouver la forme Stratonovich

$$dv_t = -iF_y v_t dt - F_z^2 v_t dt + F_z v_t \circ dW_t' \quad (5.36)$$

qui est équivalente avec (5.33). Il peut être facilement vérifié que cette équation linéaire satisfait toutes les exigences du Théorème de support.

Pour procéder, supposons que (5.35) n'est pas vérifiée. Alors

$$\mathbb{Q}(\langle v_t, v_f \rangle = 0) = 1 \quad \forall t \in [0, T]. \quad (5.37)$$

Rappelons les ensembles suivants : \mathcal{C}_{v_0} l'ensemble des trajectoires continues avec la condition initiale v_0 , et $\text{Supp}(\mathbb{Q}_{v_0})$ le plus petit sous-ensemble fermé de \mathcal{C}_{v_0} tel que $\mathbb{Q}(\{\omega \in \Omega : v_t(\omega) \in \text{Supp}(\mathbb{Q}_{v_0})\}) = 1$. Maintenant, notons par $\mathcal{T}_{v_0, t}$ le sous-ensemble de \mathcal{C}_{v_0} tel que $\langle v_t, v_f \rangle = 0$, et notons que pour tout t , $\mathcal{T}_{v_0, t}$ est fermé pour la topologie uniforme compacte. Alors (5.37) implique que $\text{Supp}(\mathbb{Q}_{v_0}) \subset \mathcal{T}_{v_0, t}$ pour tout $t \in [0, T]$. Mais d'après

le Théorème de support les solutions de (5.30) sont des éléments de $\text{Supp}(\mathbb{Q}_{v_0})$, et par le Lemme 6 il existe un temps $t \in [0, T]$ et une constante C telle que la solution de (5.30) n'est pas un élément de $\mathcal{T}_{v_0, t}$. Ainsi, nous avons une contradiction et l'assertion du lemme est démontrée. \square

Étape 2 :

Nous commençons par étendre le résultat du Lemme 5 pour que l'inégalité soit satisfaite uniformément sur un voisinage de l'ensemble de niveau \mathcal{S}_1 .

Lemme 7. *Il existe une constante positive $\gamma > 0$ telle que $\forall \rho \in \overline{\mathcal{S}_{\geq 1-\gamma}}$:*

$$\chi(\rho) < 1 - \gamma.$$

Démonstration du Lemme 7 :

Supposons que pour tout $\xi > 0$, il existe une matrice $\rho_\xi \in \mathcal{S}_{>1-\xi}$ telle que

$$1 - \xi < \chi(\rho_\xi) \leq 1.$$

En extrayant une sous-suite $\xi_n \searrow 0$ et en utilisant la compacité de \mathcal{S} , nous pouvons supposer que $\rho_{\xi_n} \rightarrow \rho_\infty \in \mathcal{S}_1$ et que $\chi(\rho_{\xi_n}) \rightarrow 1$. Mais avec le Lemme 5, $\chi(\rho_\infty) = 1 - \epsilon < 1$.

Maintenant, choisissons $s \in [0, T]$ tel que

$$\mathbb{E}V(\phi_s(\rho_\infty, 1)) = 1 - \epsilon.$$

En utilisant la Feller continuité, Théorème 16, nous pouvons écrire

$$1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \chi(\rho_{\xi_n}) \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}V(\phi_s(\rho_{\xi_n}, 1)) = \mathbb{E}V(\phi_s(\rho_\infty, 1)) = 1 - \epsilon < 1.$$

Ce qui est une contradiction. Alors, il existe $\xi > 0$ tel que $\chi(\rho) \leq 1 - \xi$ pour tout $\rho \in \mathcal{S}_{>1-\xi}$. Le résultat s'en suit en choisissant $\gamma = \xi/2$. \square

Le lemme suivant est le résultat principal de cette deuxième étape.

Lemme 8. *Prenons $\tau_\rho(\mathcal{S}_{>1-\gamma})$ le premier temps de sortie pour $\phi_t(\rho, 1)$ de l'ensemble $\mathcal{S}_{>1-\gamma}$. Alors*

$$\sup_{\rho \in \mathcal{S}_{>1-\gamma}} \mathbb{E}\tau_\rho(\mathcal{S}_{>1-\gamma}) < \infty.$$

Démonstration du Lemme 8 :

Ici, nous appliquons un résultat intéressant de [39](page 111, Lemme 4.3) :

$$\mathbb{E}\tau_\rho(\mathcal{S}_{>1-\gamma}) \leq \frac{T}{1 - \sup_{\zeta \in \mathcal{S}} \mathbb{P}\{\tau_\zeta(\mathcal{S}_{>1-\gamma}) > T\}}.$$

Nous montrons que

$$\sup_{\zeta \in \mathcal{S}} \mathbb{P}\{\tau_\zeta(\mathcal{S}_{>1-\gamma}) > T\} < 1. \quad (5.38)$$

Dans une première étape, notons que pour $\zeta \in \mathcal{S}_{\leq 1-\gamma}$, $\mathbb{P}\{\tau_\zeta(\mathcal{S}_{>1-\gamma}) > T\} = 0$.

Pour démontrer (5.38), supposons que

$$\forall \epsilon > 0, \quad \exists \zeta_\epsilon \in \mathcal{S}_{>1-\gamma}, \quad \text{tel que} \quad \mathbb{P}\{\tau_{\zeta_\epsilon}(\mathcal{S}_{>1-\gamma}) > T\} > 1 - \epsilon.$$

Alors pour tout $s \in [0, T]$, nous avons

$$\mathbb{E}V(\phi_s(\zeta_\epsilon, 1)) > (1 - \epsilon) \inf_{\rho \in \mathcal{S}_{>1-\gamma}} V(\rho) = (1 - \epsilon)(1 - \gamma).$$

Par compacité, il existe une suite $\epsilon_n \searrow 0$ et un $\zeta_\infty \in \mathcal{S}_{\geq 1-\gamma}$ tels que $\zeta_{\epsilon_n} \rightarrow \zeta_\infty$ lorsque $n \rightarrow \infty$. Donc par le Théorème 16 de Feller continuité :

$$\mathbb{E}V(\phi_s(\zeta_\infty, 1)) > 1 - \gamma \quad \forall s \in [0, T].$$

Mais celle-ci est en contradiction avec le résultat du Lemme 7 et alors $\sup_{\rho \in \mathcal{S}} \mathbb{P}\{\tau_\rho(\mathcal{S}_{>1-\gamma}) > T\} = 1 - \epsilon < 1$, ce qui implique :

$$\mathbb{E}(\tau_\rho(\mathcal{S}_{>1-\gamma})) \leq \frac{T}{1 - (1 - \epsilon)} = \frac{T}{\epsilon} < \infty$$

uniformément en ρ . \square

Étape 3 :

Dans cette étape, nous traitons la situation où l'état initial est dans l'ensemble $\mathcal{S}_{\leq 1-\gamma}$. Nous allons noter par $u_1(\rho) = -\text{Tr}[i[F_y, \rho]\rho_f]$ et par $\phi_t(\rho, u_1)$ la solution de (5.29) avec $\rho_0 = \rho$ et $u_t = u_1(\rho_t)$. Notons par \mathcal{L} l'opérateur infinitésimal faible associé au flot $\phi_t(\rho, u_1)$. Nous appliquerons les Théorèmes stochastiques de Lyapounov avec $Q_\lambda = \mathcal{S}$.

Nous commençons par montrer qu'avec une probabilité $p > 0$, lorsque la condition initiale est un élément de $\mathcal{S}_{\leq 1-\gamma}$ les trajectoires du système ne sortent jamais de l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$.

Lemme 9. *pour tout $\rho \in \mathcal{S}_{\leq 1-\gamma}$,*

$$\mathbb{P}\left\{\sup_{0 \leq t < \infty} V(\phi_t(\rho, u_1)) \geq 1 - \gamma/2\right\} \leq 1 - p = \frac{1 - \gamma}{1 - \gamma/2} < 1.$$

Démonstration du Lemme 9 :

Ce lemme est une conséquence directe du résultat classique de Kushner cité par la troisième proposition du Théorème 25 de l'Annexe C.

Nous savons que $\mathcal{L}V(\phi_t(\rho, u_1)) = -u_1^2(\rho_t)$, et alors :

$$\mathbb{P}\left\{\sup_{0 \leq t < \infty} V(\phi_t(\rho, u_1)) \geq 1 - \gamma/2\right\} \leq \frac{V(\rho)}{1 - \gamma/2} \leq \frac{1 - \gamma}{1 - \gamma/2}.$$

\square

Maintenant, nous nous restreignons aux trajectoires qui ne quittent jamais l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$. Nous allons d'abord montrer que ces trajectoires convergent vers ρ_f en probabilité. Ensuite, nous étendons ce résultat pour démontrer la convergence presque partout.

Lemme 10. *Les trajectoires de $\phi_t(\rho, u_1)$ qui ne sortent jamais de l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$ convergent en probabilité vers ρ_f , lorsque $t \rightarrow \infty$.*

Démonstration du Lemme 10 :

Considérons la fonction de Lyapounov

$$\mathcal{V}(\rho) = 1 - \text{Tr}[\rho\rho_f]^2.$$

Nous pouvons facilement voir que $\mathcal{V}(\rho) \geq 0$ pour tout $\rho \in \mathcal{S}$ et que $\mathcal{V}(\rho) = 0$ si et seulement si $\rho = \rho_f$. Un calcul direct donne

$$\mathcal{L}\mathcal{V}(\rho) = -2u_1(\rho)^2\text{Tr}[\rho\rho_f] - 4\eta(\lambda_f - \text{Tr}[\rho F_z])^2\text{Tr}[\rho\rho_f]^2 \leq 0$$

où λ_f est la valeur propre de F_z associée au vecteur propre v_f . Maintenant, notons qu'à l'aide des Théorèmes 14 et 16, toutes les conditions du Théorème 26 de l'Annexe C sont vérifiées. Ainsi, $\phi_t(\rho, u_1)$ converge en probabilité vers le plus grand ensemble invariant inclus dans $\mathcal{C} = \{\rho \in \mathcal{S} : \mathcal{L}\mathcal{V}(\rho) = 0\}$.

Pour satisfaire la condition $\mathcal{L}\mathcal{V}(\rho) = 0$, nous devons avoir $u_1(\rho)^2\text{Tr}[\rho\rho_f] = 0$ ainsi que $(\lambda_f - \text{Tr}[\rho F_z])^2\text{Tr}[\rho\rho_f]^2 = 0$. Cette dernière relation implique que

$$\text{soit } \text{Tr}[\rho\rho_f] = 0 \quad \text{soit } \text{Tr}[\rho F_z] = \lambda_f.$$

Étudions, maintenant, le plus grand ensemble invariant inclus dans $\mathcal{C}' = \{\rho \in \mathcal{S} : \text{Tr}[\rho F_z] = \lambda_f\}$. Clairement, cet ensemble invariant peut seulement contenir des matrices $\rho \in \mathcal{C}'$ pour lesquelles $\text{Tr}[\phi_t(\rho, u_1)F_z]$ est constante. À l'aide de la règle d'Itô, nous obtenons

$$d\text{Tr}[\rho_t F_z] = -iu_1(\rho_t)\text{Tr}[[F_y, \rho_t]F_z] dt + 2\sqrt{\eta}(\text{Tr}[F_z^2 \rho_t] - \text{Tr}[F_z \rho_t]^2)dW_t.$$

Ainsi, pour que la quantité $\text{Tr}[\phi_t(\rho, u_1)F_z]$ reste constante, nous devons au moins avoir

$$\text{Tr}[F_z^2 \rho] - \text{Tr}[F_z \rho]^2 = 0.$$

Mais alors, comme dans la preuve du Théorème 19, celle-ci implique que $\rho = \psi_m \psi_m^*$ pour un certain m , et donc les seules possibilités sont $V(\rho) = 0$ (pour $\rho = v_f v_f^*$) où bien $V(\rho) = 1$.

Via la discussion au-dessus, il est évident que le plus grand sous-ensemble invariant de \mathcal{C} doit être inclus dans l'ensemble $\{\rho_f\} \cup \mathcal{S}_1$. Mais alors les trajectoires qui ne quittent jamais l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$ doivent converger en probabilité vers ρ_f . \square

Lemme 11. *$\phi_t(\rho, u_1)$ converge vers ρ_f lorsque $t \rightarrow \infty$ pour presque toute trajectoire ne sortant jamais de l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$.*

Démonstration du Lemme 11 :

Définissons l'événement $P_{<1-\gamma/2}^\rho = \{\omega \in \Omega : \phi_t(\rho, u_1) \text{ ne quitte jamais } \mathcal{S}_{<1-\gamma/2}\}$. Alors le Lemme 10 implique que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left(\|\phi_t(\rho, u_1) - \rho_f\| > \epsilon \mid P_{<1-\gamma/2}^\rho \right) = 0 \quad \forall \epsilon > 0.$$

Par continuité de V , nous avons

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left(V(\phi_t(\rho, u_1)) > \epsilon \mid P_{<1-\gamma/2}^\rho \right) = 0 \quad \forall \epsilon > 0.$$

Comme $V(\rho) \leq 1$, nous avons

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left(V(\phi_t(\rho, u_1)) \mid P_{<1-\gamma/2}^\rho \right) &\leq \mathbb{P} \left(V(\phi_t(\rho, u_1)) > \epsilon \mid P_{<1-\gamma/2}^\rho \right) \\ &\quad + \epsilon \left[1 - \mathbb{P} \left(V(\phi_t(\rho, u_1)) > \epsilon \mid P_{<1-\gamma/2}^\rho \right) \right]. \end{aligned}$$

Alors

$$\limsup_{t \rightarrow \infty} \mathbb{E} \left(V(\phi_t(\rho, u_1)) \mid P_{<1-\gamma/2}^\rho \right) \leq \epsilon \quad \forall \epsilon > 0$$

ce qui implique

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{E} \left(V(\phi_t(\rho, u_1)) \mid P_{<1-\gamma/2}^\rho \right) = 0.$$

Mais, nous savons par le Théorème 25 de l'Annexe C que $V(\phi_t(\rho, u_1))$ converge presque sûrement. Comme V est bornée, à l'aide du Théorème de la convergence dominée, nous obtenons

$$\mathbb{E} \left(\lim_{t \rightarrow \infty} V(\phi_t(\rho, u_1)) \mid P_{<1-\gamma/2}^\rho \right) = 0$$

ce qui termine la démonstration. \square

Étape 4 :

Il nous reste à combiner les résultats des étapes 2 et 3 pour démontrer la stabilité globale. Nous noterons par u la loi de contrôle du Théorème 20 et par $\phi_t(\rho, u)$ la solution associée. Notons que $\phi_t(\rho, u)$ n'est pas un processus de Markov car le contrôle u dépend de l'histoire de la solution. Toutefois, le processus est "presque" de Markov dans le sens suivant : prenons τ et τ' deux temps d'arrêt consécutifs pour lesquels le contrôle u saute entre les valeurs 1 et u_1 (i.e. le contrôle est soit 1 soit u_1 pour tout $\tau \leq t < \tau'$). Alors $\phi_{\tau+t}(\rho, u)$ est un processus de Markov fort avant le temps d'arrêt $t = \tau' - \tau$. Nous utilisons cette propriété pour démontrer le lemme suivant :

Lemme 12. *Pour presque toute trajectoire $\phi_t(\rho, u)$, il existe un temps $T < \infty$ après lequel les trajectoires ne sortent pas de l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$ et la loi active du contrôle est u_1 .*

Démonstration du Lemme 12 :

Nous commençons par définir la suite suivante des temps d'arrêts. Prenons $\tau_1 = \inf\{t \geq 0 : \phi_t(\rho, u) \in \mathcal{S}_{\leq 1-\gamma/2}\}$, et notons qu'à l'aide du Lemme 8, $\tau_1 < \infty$ p.s. (et $\tau_1 = 0$ si $\rho \in \mathcal{S}_{\leq 1-\gamma}$). De plus, prenons

$$\begin{aligned} \sigma_n &= \inf\{t \geq \tau_n : \phi_t(\rho, u) \in \mathcal{S}_{\geq 1-\gamma/2}\} & n = 1, 2, \dots \\ \tau_n &= \inf\{t \geq \sigma_{n-1} : \phi_t(\rho, u) \in \mathcal{S}_{\leq 1-\gamma}\} & n = 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Nous pouvons, maintenant, substituer un contrôle Markov pour u , dans chaque intervalle entre les temps d'arrêt consécutifs, i.e.

$$\begin{aligned}\phi_{\tau_n+t}(\rho, u) &= \phi_{\tau_n+t}(\rho, u_1) && \text{pour } t < \sigma_n - \tau_n \\ \phi_{\sigma_n+t}(\rho, u) &= \phi_{\sigma_n+t}(\rho, 1) && \text{pour } t < \tau_{n+1} - \sigma_n\end{aligned}$$

si nous définissons $\phi_\infty(\rho, u) = \phi_\infty(\rho, u_1) = \phi_\infty(\rho, 1) = \partial$ où ∂ est un état de cercueil. En utilisant la propriété forte de Markov, nous obtenons

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\sigma_n < \infty \text{ et } \tau_n < \infty) &= \\ &\int \chi_{\tau_n < \infty}(\tilde{\omega}) \mathbb{P}(\phi_t(\rho_{\tau_n}(\tilde{\omega}), u_1) \text{ quitte } \mathcal{S}_{<1-\gamma/2} \text{ dans un temps fini}) \mathbb{P}(d\tilde{\omega})\end{aligned}$$

ce qui implique

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\sigma_n < \infty \mid \tau_n < \infty) &= \\ &\int \mathbb{P}(\phi_t(\rho_{\tau_n}(\tilde{\omega}), u_1) \text{ quitte } \mathcal{S}_{<1-\gamma/2} \text{ dans un temps fini}) \mathbb{P}(d\tilde{\omega} \mid \tau_n < \infty).\end{aligned}$$

Mais $\rho_{\tau_n} \in \mathcal{S}_{\leq 1-\gamma}$ sur un ensemble Ω_{τ_n} avec $\mathbb{P}(\Omega_{\tau_n} \mid \tau_n < \infty) = 1$. Alors par le Lemme 9

$$\mathbb{P}(\sigma_n < \infty \mid \tau_n < \infty) \leq 1 - p.$$

Via un argument similaire, et utilisant le Lemme 8, nous obtenons

$$\mathbb{P}(\tau_n < \infty \mid \sigma_{n-1} < \infty) = 1.$$

Mais, notons que par construction

$$\mathbb{P}(\tau_n < \infty \mid \sigma_n < \infty) = \mathbb{P}(\sigma_{n-1} < \infty \mid \tau_n < \infty) = 1.$$

Ainsi, nous obtenons

$$\begin{aligned}\frac{\mathbb{P}(\sigma_n < \infty)}{\mathbb{P}(\sigma_{n-1} < \infty)} &= \frac{\mathbb{P}(\tau_n < \infty \mid \sigma_n < \infty) \mathbb{P}(\sigma_n < \infty)}{\mathbb{P}(\tau_n < \infty)} \frac{\mathbb{P}(\sigma_{n-1} < \infty \mid \tau_n < \infty) \mathbb{P}(\tau_n < \infty)}{\mathbb{P}(\sigma_{n-1} < \infty)} \\ &= \mathbb{P}(\sigma_n < \infty \mid \tau_n < \infty) \mathbb{P}(\tau_n < \infty \mid \sigma_{n-1} < \infty) \leq 1 - p.\end{aligned}$$

Mais $\mathbb{P}(\sigma_1 < \infty) = \mathbb{P}(\sigma_1 < \infty \mid \tau_1 < \infty) \leq 1 - p$ comme $\tau_1 < \infty$ presque sûrement. Alors

$$\mathbb{P}(\sigma_n < \infty) \leq (1 - p)^n$$

et donc

$$\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}(\sigma_n < \infty) \leq \sum_{n=1}^{\infty} (1 - p)^n = \frac{1 - p}{p} < \infty.$$

Via le Lemme de Borel-Cantelli, nous pouvons conclure que

$$\mathbb{P}(\sigma_n < \infty \text{ pour un nombre infini des } n) = 0.$$

Alors, pour presque toute trajectoire, il existe un entier $N < \infty$ tel que $\sigma_n = \infty$ (et alors aussi $\tau_{n+1} = \infty$) pour tout $n \geq N$, et tel que $\sigma_n < \infty$ (et alors aussi $\tau_{n+1} < \infty$) pour tout $n < N$, ce qui implique l'assertion. \square

Finalement, nous pouvons mettre tous ces ingrédients ensemble et compléter la preuve du Théorème 20.

Démonstration du Théorème 20 :

Nous devons vérifier trois choses : que l'état cible ρ_f est (localement) stable en probabilité ; que presque toutes les trajectoires sont attirées par l'état cible lorsque $t \rightarrow \infty$; et que cela est également vrai pour la valeur moyenne.

1. Pour étudier la stabilité locale, nous pouvons nous restreindre au processus arrêté

$$\phi_{t \wedge \tilde{\tau}}(\rho, u) = \phi_{t \wedge \tilde{\tau}}(\rho, u_1), \quad \tilde{\tau} = \inf\{t : \phi_t(\rho, u) \notin \mathcal{S}_{<1-\gamma/2}\}.$$

Notons par $\tilde{\mathcal{L}}$ l'opérateur infinitésimal faible de $\phi_{t \wedge \tilde{\tau}}(\rho, u_1)$, et notons que le Théorème 18 nous permet de calculer $\tilde{\mathcal{L}}V$ à partir de (5.29) de manière naturelle. En particulier, nous trouvons $\tilde{\mathcal{L}}V(\rho) = -u_1(\rho)^2 \leq 0$ pour $\rho \in \mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$. Alors, nous pouvons appliquer le Théorème 25 de l'Annexe C avec $Q_\lambda = \mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$ pour conclure la stabilité en probabilité.

2. À partir des Lemmes 11 et 12, nous avons que $\phi_t(\rho, u) \rightarrow \rho_f$ p.s. lorsque $t \rightarrow \infty$.
3. Nous avons démontré que

$$\mathbb{E} \left[\lim_{t \rightarrow \infty} V(\phi_t(\rho, u)) \right] = V(\rho_f) = 0.$$

Mais, comme V est uniformément bornée, par le Théorème de la convergence dominée, nous avons

$$V \left(\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{E} \phi_t(\rho, u) \right) = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{E} [V(\phi_t(\rho, u))] = 0$$

où nous avons utilisé que V est linéaire et continue. Alors $\mathbb{E} \phi_t(\rho, u) \rightarrow \rho_f$.

Cela termine la preuve. \square

5.4 Système à deux-qubits

Dans cette section, nous démontrons un résultat similaire à celui de la section précédente pour l'intrication des états d'un système à deux spins. Le modèle considéré est alors celui de la Section 5.1, i.e. l'équation (5.2). Nous avons l'énoncé suivant :

Théorème 21. *Considérons la loi de feedback suivante*

1. $u_1(t) = 1 - \text{Tr}[i[\sigma_y^1, \rho_t]\rho_a]$, $u_2(t) = 1 - \text{Tr}[i[\sigma_y^2, \rho_t]\rho_a]$ lorsque $\text{Tr}[\rho\rho_a] \geq \gamma$;
2. $u_1 = 1, u_2 = 0$ si $\text{Tr}[\rho\rho_a] \leq \gamma/2$;
3. lorsque $\rho_t \in \mathcal{B}_a = \{\rho : \gamma/2 < \text{Tr}[\rho\rho_a] < \gamma\}$, nous regardons l'histoire du processus dans l'ensemble \mathcal{B}_a . Si la dernière entrée dans cet ensemble est faite à travers la frontière

$$\Gamma_{(\gamma/2)} = \{\rho : \text{Tr}[\rho\rho_a] = \gamma/2\},$$

nous considérons la loi de feedback de la deuxième situation et sinon nous prenons celle de la première.

Alors $\exists \gamma > 0$ t.q. (5.2) est globalement stable autour de l'état anti-symétrique ρ_a et $\mathbb{E}\rho_t \rightarrow \rho_a$ lorsque $t \rightarrow \infty$. De la même façon, la loi de feedback

1. $u_1 = 1 - \text{Tr}[i[\sigma_y^1, \rho_t]\rho_s]$, $u_2 = -1 - \text{Tr}[i[\sigma_y^2, \rho_t]\rho_s]$ lorsque $\text{Tr}[\rho\rho_s] \geq \gamma$;
2. $u_1 = 1, u_2 = 0$ si $\text{Tr}[\rho\rho_s] \leq \gamma/2$;
3. lorsque $\rho_t \in \mathcal{B}_s = \{\rho : \gamma/2 < \text{Tr}[\rho\rho_s] < \gamma\}$, nous regardons l'histoire du processus dans l'ensemble \mathcal{B}_s . Si la dernière entrée dans cet ensemble est faite à travers la frontière

$$\Gamma_{(\gamma/2)} = \{\rho : \text{Tr}[\rho\rho_s] = \gamma/2\},$$

nous considérons la loi de feedback de la deuxième situation et sinon nous prenons celle de la première.

stabilise le système autour de l'état symétrique ρ_s .

Nous démontrerons le résultat dans le cas anti-symétrique ; la preuve du cas symétrique peut être faite exactement de la même manière. Nous procédons comme pour la démonstration du Théorème 20.

Étape 1 :

La démonstration du Lemme 5 peut être faite de la même façon et la seule chose à démontrer est un résultat analogue à celui du Lemme 6. En fait, on peut facilement voir que la matrice

$$A = -i\sigma_y^1 - F_z^2 + 2F_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -8 \end{pmatrix}$$

admet pour matrices de diagonalisation ($A = PDP^{-1}$) :

$$P = \begin{pmatrix} 0.7071 & 0.7071 & 0 & 0 \\ -0.7071i & 0.7071i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & .9920 & .1260 \\ 0 & 0 & .1260 & .9920 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -.1270 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -7.7830 \end{pmatrix}.$$

Donc la matrice A a un spectre non-dégénéré et de plus

$$\tilde{v}_a = \frac{1}{\sqrt{2}} P v_a = [-.5i, .5i, -.7015, -.0981]^\dagger$$

n'a pas de coefficient nul, ce qui implique le résultat du Lemme 5.

Étape 2 :

Les preuves des Lemmes 7 et 8 sont directes et ne posent pas de problème.

Étape 3 :

Les preuves des Lemmes 9 et 11 peuvent être faites de la même façon. Le résultat suivant remplace le Lemme 10. Notons par $U_1(\rho) = 1 - \text{Tr}[i[\sigma_1^y, \rho]\rho_a]$, $U_2(\rho) = 1 - \text{Tr}[i[\sigma_y^2, \rho]\rho_a]$ et par $\phi_t(\rho, U_1, U_2)$ la solution associée au (5.2).

Lemme 13. *Presque toute trajectoire de $\phi_t(\rho, U_1, U_2)$ ne sortant jamais de l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$ converge en probabilité vers ρ_a lorsque $t \rightarrow \infty$.*

Démonstration du Lemme 13 :

Considérons la fonction de Lyapounov

$$\mathcal{V}(\rho) = 1 - \text{Tr}[\rho\rho_a]^2.$$

Nous pouvons facilement voir que $\mathcal{V}(\rho) \geq 0$ pour tout $\rho \in \mathcal{S}$ et que $\mathcal{V}(\rho) = 0$ si et seulement si $\rho = \rho_a$. Un calcul direct donne

$$\mathcal{L}\mathcal{V}(\rho) = -2[(U_1(\rho) - 1)^2 + (U_2(\rho) - 1)^2] \text{Tr}[\rho\rho_a] - 4\eta \text{Tr}[\rho F_z]^2 \text{Tr}[\rho\rho_a]^2 \leq 0$$

où \mathcal{L} est l'opérateur infinitésimal faible associé au $\phi_t(\rho, U_1, U_2)$ (ici nous avons utilisé $[F_y, \rho_a] = 0$ en calculant cette expression). Maintenant, notons que toutes les conditions du Théorème 26 de l'Annexe C sont satisfaites. Alors $\phi_t(\rho, U_1, U_2)$ converge en probabilité vers le plus grand ensemble invariant inclus dans $\mathcal{C} = \{\rho \in \mathcal{S} : \mathcal{L}\mathcal{V}(\rho) = 0\}$.

Pour satisfaire la condition $\mathcal{L}\mathcal{V}(\rho) = 0$, nous devons au moins avoir

$$\text{soit } \text{Tr}[\rho\rho_a] = 0 \quad \text{soit } \text{Tr}[\rho F_z] = 0.$$

Étudions le plus grand ensemble invariant inclus dans $\mathcal{C}' = \{\rho \in \mathcal{S} : \text{Tr}[\rho F_z] = 0\}$. Clairement cet ensemble invariant peut seulement contenir les $\rho \in \mathcal{C}'$ pour lesquelles $\text{Tr}[\phi_t(\rho, U_1, U_2)F_z]$ est constante. Via la règle d'Itô, nous avons

$$d \text{Tr}[\rho_t F_z] = - \sum_{j=1}^2 U_j(\rho_t) \text{Tr}[i[\sigma_y^j, \rho_t]F_z] dt + 2\sqrt{\eta} (\text{Tr}[F_z^2 \rho_t] - \text{Tr}[F_z \rho_t]^2) dW_t.$$

Ainsi, pour que la quantité $\text{Tr}[\phi_t(\rho, U_1, U_2)F_z]$ reste constante, nous devons au moins avoir

$$\text{Tr}[F_z^2 \rho] - \text{Tr}[F_z \rho]^2 = 0$$

ce qui implique que ρ doit être un état propre de F_z . Ce dernier peut seulement être de la forme : $\rho = \psi_{\uparrow\uparrow}\psi_{\uparrow\uparrow}^*$ ou $\rho = \psi_{\downarrow\downarrow}\psi_{\downarrow\downarrow}^*$, ou bien ρ est un état de la forme

$$\rho = \alpha\psi_{\uparrow\downarrow}\psi_{\uparrow\downarrow}^* + \beta\psi_{\downarrow\uparrow}\psi_{\downarrow\uparrow}^* + \beta^*\psi_{\downarrow\uparrow}\psi_{\uparrow\downarrow}^* + (1 - \alpha)\psi_{\downarrow\uparrow}\psi_{\downarrow\uparrow}^*. \quad (5.39)$$

Étudions le dernier cas. Notons que la matrice densité de la forme (5.39) satisfait $F_z\rho = \rho F_z = 0$. Supposons que (5.2) avec $u_1 = U_1$ et $u_2 = U_2$ laisse l'ensemble (5.39) invariant ; ainsi la solution en temps t de

$$\frac{d}{dt}\rho_t = -i[F_y, \rho_t] \quad (5.40)$$

doit coïncider avec $\phi_t(\rho, U_1, U_2)$ lorsque ρ est de la forme 5.39, et en particulier (5.40) doit laisser l'ensemble (5.39) invariant (ici nous pouvons utiliser le fait que $U_1(\rho) = U_2(\rho) = 1$ pour ρ de la forme (5.39)). Nous assurons que cela arrive seulement si $\rho = \rho_a$, ce qui implique que, parmi tous les états de la forme (5.39), seulement ρ_a est dans l'ensemble invariant. Pour cela, notons que d'après la remarque 19, nous pouvons écrire ρ sous la forme (5.39) comme une combinaison convexe $\sum_i \lambda_i \psi^i \psi^{i*}$ des vecteurs unités $\psi^i \in \text{span}(\{\psi_{\uparrow\downarrow}, \psi_{\downarrow\uparrow}\})$. Alors la solution en temps t de (5.40) est donnée par $\sum_i \lambda_i \psi_t^i \psi_t^{i*}$ avec

$$\frac{d}{dt}\psi_t^i = -iF_y\psi_t^i, \quad \psi_0^i = \psi^i.$$

Mais $F_y\psi^i \notin \text{span}(\{\psi_{\uparrow\downarrow}, \psi_{\downarrow\uparrow}\})$ sauf si $\psi^i \propto \psi_{\uparrow\downarrow} - \psi_{\downarrow\uparrow}$, ce qui implique l'assertion.

D'après la discussion ci-dessus, il est évident que le plus grand ensemble invariant inclus dans \mathcal{C} doit être contenu dans l'ensemble $\{\rho_a\} \cup \mathcal{S}_1$. Mais alors, les trajectoires qui ne quittent jamais l'ensemble $\mathcal{S}_{<1-\gamma/2}$ doivent converger en probabilité vers ρ_a . \square

Étape 4 :

Le reste de la preuve du Théorème 21 se fait de la même manière que dans la section précédente.

Conclusion

Plusieurs problèmes ont été abordés dans cette thèse. Certains n'ont été que partiellement résolus. Nous en rappelons quelques uns en guise de conclusion en espérant qu'ils puissent servir de guide pour des recherches à venir :

1. Dans le Chapitre 1 nous avons considéré la contrôlabilité d'un champs électromagnétique quantique dans une cavité avec des contrôles classiques. Nous avons vu que pour pouvoir contrôler les degrés de liberté quantiques, nous devons ajouter des dynamiques quantiques dans la cavité. Cela a conduit à deux modèles typiques et correspondant à des expériences réelles : le modèle de Jaynes et Cummings et le modèle des ions piégés. Après certaines simplifications, ces deux modèles s'écrivent sous la forme de deux systèmes d'équations aux dérivées partielles avec contrôle :

Modèle de Jaynes et Cummings :

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi_g}{\partial t} &= \left(x + u_1 + \frac{\partial}{\partial x} + iu_2 \right) \psi_e \\ i \frac{\partial \psi_e}{\partial t} &= \left(x + u_1 - \frac{\partial}{\partial x} - iu_2 \right) \psi_g \end{aligned}$$

où $u = u_1 + iu_2 \in \mathbb{C}$ est le contrôle.

Modèle des ions piégés :

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi_g}{\partial t} &= \frac{\Omega}{2} \left(x^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi_g + u e^{-i\eta x} \psi_e \\ i \frac{\partial \psi_e}{\partial t} &= u^* e^{i\eta x} \psi_g + \frac{\Omega}{2} \left(x^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi_e. \end{aligned}$$

Ici $u \in \mathbb{C}$ est le contrôle et $\eta \ll 1$ est le paramètre de Lamb-Dicke. La contrôlabilité de ces deux systèmes d'état $(\psi_g, \psi_e) \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ semble être un problème intéressant. Comme les systèmes linearisés ne sont pas contrôlables, une piste pourrait être d'avoir recours à la méthode du retour due à J.M. Coron [36, 37, 15].

2. Dans le Chapitre 2, nous avons étudié la génération de trajectoires pour un système de dimension finie à l'aide des méthodes de Lyapounov. Un problème soulevé au cours

de l'analyse était dû à la dégénérescence du linéaire tangent d'où provient l'hypothèse clé du Théorème 2. Ce problème est le suivant. Supposons que

$$i \frac{d}{dt} \Psi = (H_0 + uH_1) \Psi$$

soit contrôlable. Peut-on toujours trouver un $\bar{u} \in \mathbb{R}$ tel que le système linéarisé autour d'un état propre de $H_0 + \bar{u}H_1$ soit contrôlable? Tous les exemples que nous avons analysés justifient cette conjecture.

Un autre prolongement naturel pourrait être de généraliser ces résultats au cas de la dimension infinie. L'obstacle principal que nous avons rencontré lors de cette généralisation est dû à la pré-compacité des trajectoires. Un exemple particulier de ce genre (particule dans le puits de potentiel infini) a été développé à la fin de ce chapitre, et les enjeux principaux ont été présentés.

3. Dans le Chapitre 3, nous avons étudié le problème de l'identification de l'Hamiltonien à partir des mesures du laboratoire. Nous avons démontré que le fondement mathématique de ce problème inverse dans la configuration de dimension finie est bien posé. L'étude du cas de dimension infinie restant ouverte, elle nous semble être plus délicate que le cas traité. De plus, nous avons développé un algorithme numérique partiellement efficace pour résoudre ce problème inverse. Une amélioration de la méthode numérique peut constituer un sujet intéressant pour des futures recherches.
4. Finalement, dans le Chapitre 5, nous étudions la stabilisation des filtres quantiques. Ces modèles deviennent intéressants surtout lorsque le contrôle par feedback (et donc la mesure continue) d'un seul système quantique est considéré. La convergence pour deux modèles physiques de ce genre a été étudiée. Néanmoins, la simplicité de la méthode nous permet de l'appliquer à de nombreux modèles du même genre. Il nous semble que cette approche peut être généralisée en une méthodologie pour la stabilisation des filtres quantiques de dimension finie. De plus, nous ne disposons pas, à ce jour, d'estimation pour le temps de convergence de cette méthode.

Annexe A

Contrôlabilité des systèmes quantiques

Considérons un système quantique

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) &= H_0 \Psi(t) + u(t) H_1 \Psi(t) \\ \Psi(t=0) &= \Psi_0.\end{aligned}\tag{A.1}$$

La contrôlabilité d'un tel système dans sa configuration de dimension finie (i.e., $\Psi \in \mathbb{C}^N$, H_0 et H_1 des matrices Hermitiennes $N \times N$ à coefficients dans \mathbb{C}) a été étudiée via divers outils [1, 3, 24, 109, 123, 131].

Un résultat important, qui lie ce problème de contrôlabilité à la structure de l'algèbre de Lie engendrée par H_0 et H_1 est le suivant [1] :

Théorème 22. *Le système de dimension finie (A.1) est contrôlable si et seulement si \mathcal{L} l'algèbre de Lie engendrée par H_0 et H_1 est isomorphe (conjugué) à l'algèbre symplectique $sp(N/2)$ ou à l'algèbre des matrices anti-Hermitiennes de trace nulle $su(N)$, si la dimension N est paire, et à $su(N)$, si la dimension N est impaire.*

Une deuxième approche consiste à diagonaliser l'Hamiltonien H_0 pour retrouver les valeurs propres $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$ et les vecteurs propres $\{v_i\}_{i=1}^N$. Nous définissons alors le graphe de connectivité de la matrice d'interaction $H_1 : G = (A, V)$. Chaque état v_i est un sommet du graphe G et l'ensemble des arêtes, noté A , est défini de la manière suivante : nous introduisons une arête entre les sommets v_i et v_j lorsque B_{ij} (le coefficient ij de la matrice H_1 écrite dans la base propre de H_0) est non-nul. Deux états v_i et v_j sont dits connectés par un chemin s'il existe un ensemble d'arêtes qui lie l'état v_i à l'état v_j . Le graphe G est dit connexe si chaque paire de sommets est connecté par un chemin du graphe. Turinici et. al. ont montré que [130, 131]

Théorème 23. *Supposons que le graphe G est connexe et que les transitions de l'Hamiltonien interne H_0 sont non-dégénérées :*

$$|\lambda_i - \lambda_j| \neq |\lambda_k - \lambda_l|, \quad i, j, k, l = 1, \dots, N, \quad i \neq j, \quad k \neq l, \quad \{i, j\} \neq \{k, l\}.$$

Alors le système (A.1) est contrôlable.

Le problème de la contrôlabilité d'un système quantique dans sa configuration de dimension infinie est un problème difficile. Les seuls résultats généraux existants pour ce type de systèmes sont négatifs (voir par exemple, [8, 128, 129]) et les résultats positifs de contrôlabilité sont limités aux cas tests et restent partiels (voir par exemple, [15]). Voici un résultat de non-contrôlabilité dans cette configuration [129] :

Théorème 24. *Soit H_1 un opérateur borné de l'espace de Sobolev $H^2(\mathbb{R}^\gamma)$ (γ est la dimension de la variable d'espace x) dans lui-même et supposons que H_0 génère un semi-groupe C^0 d'opérateurs linéaires sur $H^2(\mathbb{R}^\gamma)$. Notons par $\Psi_u(x, t)$ la solution de (A.1). Alors l'ensemble des états atteignables à partir de Ψ_0 défini par*

$$\mathcal{AS} = \bigcup_{T>0} \{\Psi_u(x, T) : u(t) \in L^2([0, T])\}$$

est contenu dans une union dénombrable de sous-ensembles compacts de $H^2(\mathbb{R}^\gamma)$. En particulier son complémentaire dans $\mathbb{S} : \mathcal{N} = \mathbb{S} \setminus \mathcal{AS}$ est dense partout dans \mathbb{S} . La même conclusion peut être obtenue pour le complémentaire dans $\mathbb{S} \cap H^2(\mathbb{R}^\gamma)$.

Annexe B

Systèmes lents/rapides

Nous rappelons ici une approximation qui peut être justifiée parfaitement à l'aide des techniques géométriques de perturbation singulière et de variété centre [65, 30, 38].

Considérons le système lent/rapide (x et y ont des dimensions arbitraires, f et g sont des fonctions régulières)

$$\frac{d}{dt}x = f(x, y), \quad \frac{d}{dt}y = -\frac{1}{\epsilon}Ay + g(x, y)$$

où x et y sont respectivement les états lent et rapide (coordonnées de Tikhonov), toutes les valeurs propres de la matrice A ont des parties réelles strictement négatives, et ϵ est un petit paramètre strictement positif. Alors la variété invariante attractive admet pour équation

$$y = \epsilon A^{-1}g(x, 0) + O(\epsilon^2)$$

et la restriction des dynamiques sur cette variété invariante lente s'écrit

$$\frac{d}{dt}x = f(x, \epsilon A^{-1}g(x, 0)) + O(\epsilon^2) = f(x, 0) + \epsilon \frac{\partial f}{\partial y}|_{(x,0)} A^{-1}g(x, 0) + O(\epsilon^2).$$

Le développement de Taylor pour g peut être utilisé pour trouver les termes d'ordres plus élevés. Par exemple, le terme d'ordre deux dans le développement de y est donné par :

$$y = \epsilon A^{-1}g(x, 0) + \epsilon^2 A^{-1} \left(\frac{\partial g}{\partial y}|_{(x,0)} A^{-1}g(x, 0) - A^{-1} \frac{\partial g}{\partial x}|_{(x,0)} f(x, 0) \right) + O(\epsilon^3),$$

et ainsi de suite.

Annexe C

Lyapounov stochastiques

La théorie de la stabilité de Lyapounov et le théorème d'invariance de LaSalle sont des outils importants pour l'analyse et le contrôle des systèmes déterministes (voir par exemple le Chapitre 2). De façon similaire, leurs analogues stochastiques jouent un rôle important pour le problème de stabilisation étudié dans le Chapitre 5. Le sujet de la stabilité stochastique a été étudié par Has'minskii [56] et Kushner [73].

Définition 1. *Considérons x_t^z , un processus de diffusion sur l'espace métrique X , avec l'état initial $x_0 = z$. prenons \bar{z} une position d'équilibre de la diffusion, i.e. $x_t^{\bar{z}} = \bar{z}$. Alors*

1. *le point d'équilibre \bar{z} est stable en probabilité si*

$$\lim_{z \rightarrow \bar{z}} \mathbb{P} \left(\sup_{0 \leq t < \infty} \|x_t^z - \bar{z}\| \geq \epsilon \right) = 0 \quad \forall \epsilon > 0$$

2. *le point d'équilibre \bar{z} est globalement stable s'il est stable en probabilité et de plus*

$$\mathbb{P} \left(\lim_{t \rightarrow \infty} x_t^z = \bar{z} \right) = 1 \quad \forall z \in X$$

Dans les théorèmes qui suivent, nous considérons les hypothèses suivantes :

1. L'espace d'état X est un espace métrique complet et séparable. x_t^z est un processus de Markov fort homogène sur X à trajectoires continues.
2. $V(\cdot)$ est une fonction réelle continue et non-négative sur X .
3. Pour $\lambda > 0$, prenons $Q_\lambda = \{x \in X : V(x) < \lambda\}$ et supposons que Q_λ est non-vide. Prenons $\tau_\lambda = \inf\{t : x_t^z \notin Q_\lambda\}$ et définissons le processus arrêté $\tilde{x}_t^z = x_{t \wedge \tau_\lambda}^z$.
4. \mathcal{L}_λ est le générateur infinitésimal faible de \tilde{x}_t et V est dans le domaine de cet opérateur.

Le théorème suivant peut être trouvé dans les références [73, 75, 74].

Théorème 25. *Supposons $\mathcal{L}_\lambda V \leq 0$ dans Q_λ . Nous avons alors les résultats suivants :*

1. $\lim_{t \rightarrow \infty} V(\tilde{x}_t^z)$ existe p.s., donc $V(x_t^z)$ converge pour p.t. (presque toute) trajectoire restant dans Q_λ .
2. $\mathbb{P} \lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{L}_\lambda V(\tilde{x}_t^z) = 0$, donc $\mathcal{L}_\lambda V(x_t^z) \rightarrow 0$ en probabilité lorsque $t \rightarrow \infty$ pour presque toutes les trajectoires ne quittant jamais l'ensemble Q_λ .
3. Pour $z \in Q_\lambda$, nous avons l'estimation uniforme

$$\mathbb{P} \left(\sup_{0 \leq t < \infty} V(x_t^z) \geq \lambda \right) = \mathbb{P} \left(\sup_{0 \leq t < \infty} V(\tilde{x}_t^z) \geq \lambda \right) \leq \frac{V(z)}{\lambda}.$$

4. Si $V(\tilde{z}) = 0$ et $V(x) \neq 0$ pour $x \neq \tilde{z}$, alors \tilde{z} est stable en probabilité.

Le théorème suivant est une version stochastique du Théorème d'invariance de LaSalle. Rappelons qu'un processus est dit Feller continu si pour un t fixé, $\mathbb{E}G(x_t^z)$ est continue en z pour toute fonction bornée continue G .

Théorème 26. *Supposons $\mathcal{L}_\lambda V \leq 0$ dans Q_λ . Supposons de plus que Q_λ admet une fermeture compact, \tilde{x}_t^z est Feller continu, et $\mathbb{P}(\|\tilde{x}_t^z - z\| > \epsilon) \rightarrow 0$ lorsque $t \rightarrow 0$ pour tout $\epsilon > 0$, uniformément pour $z \in Q_\lambda$. Alors \tilde{x}_t^z converge en probabilité vers le plus grand ensemble invariant inclus dans $C_\lambda = \{x \in Q_\lambda : \mathcal{L}_\lambda V(x) = 0\}$. Ainsi x_t^z converge en probabilité vers le plus grand ensemble invariant inclus dans C_λ pour presque toute trajectoire qui ne quitte jamais Q_λ .*

Annexe D

Théorème de support

Les méthodes géométriques jouent un rôle important dans le contrôle non-linéaire des systèmes déterministes. Les techniques d'algèbre de Lie appliquées aux champs de vecteurs qui génèrent le système de contrôle constituent une classe importante de ces méthodes. Généralement, nous ne pouvons pas appliquer directement ces méthodes aux systèmes stochastiques, car les processus correspondants ne sont pas (suffisamment) différentiables. Le théorème de support pour les équations différentielles stochastiques dans sa version originale, introduit par Strook et Varadhan [120], connecte les événements de probabilité 1 pour une équation différentielle stochastique aux propriétés de la solution d'un système déterministe associé. Ainsi, nous pouvons appliquer les techniques classiques au système déterministe et ensuite évoquer le théorème de support pour appliquer les résultats au système stochastique ; voir par exemple [71] pour l'application des techniques algébriques de Lie aux systèmes stochastiques.

Nous formulons le théorème sous la forme suivante [71, 72] :

Théorème 27. *Supposons M une variété C^∞ connexe et para-compacte et considérons X_k , $k = 0, \dots, n$ les champs de vecteurs C^∞ sur M tels que toute combinaison linéaire des X_k est complète. Supposons que $X_k = \sum_l X_k^l(x) \partial_l$ dans les coordonnées locales et considérons l'équation de Stratonovich*

$$dx_t = X_0(x_t)dt + \sum_{k=1}^n X_k(x_t) \circ dW_t^k \quad x_0 = x.$$

Considérons de plus le système déterministe avec le contrôle suivant :

$$\frac{d}{dt}x_t^u = X_0(x_t^u) + \sum_{k=1}^n X_k(x_t^u)\nu^k(t) \quad x_0^u = x$$

avec $\nu_k \in \mathcal{V}$, l'ensemble des fonctions constantes par morceaux de \mathbb{R}^+ dans \mathbb{R} . Alors

$$\text{Supp}(\mathbb{P}_x) = \overline{\{\psi(x, \nu) : \nu \in \mathcal{V}^n\}} \subset \mathcal{C}_x.$$

Ici \mathcal{C}_x est l'ensemble de toutes les trajectoires continues de \mathbb{R}^+ dans M admettant x comme état initial. Cet ensemble est équipé par la topologie de la convergence uniforme sur tout compact. D'autre part, $\text{Supp}(\mathbb{P}_x)$ est le plus petit sous-ensemble fermé de \mathcal{C}_x tel que $\mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : \psi(x, \nu)(\omega) \in \text{Supp}(\mathbb{P}_x) \forall t\}) = 1$.

Bibliographie

- [1] F. Albertini and D. D'Alessandro. Notions of controllability for bilinear multilevel quantum systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 48(8) :1399–1403, 2003.
- [2] O.F. Alis, H. Rabitz, M.Q. Phan, C. Rosenthal, and M. Pence. On the inversion of quantum mechanical systems : Determining the amount and type of data for a unique solution. *J. Math. Chem.*, 35 :65–78, 2004.
- [3] C. Altafini. Controllability of quantum mechanical systems by root space decomposition of $\mathfrak{su}(n)$. *Journal of Mathematical Physics*, 43(5) :2051–2062, 2002.
- [4] C. Altafini. Feedback stabilization of quantum ensembles : a global convergence analysis on complex flag manifolds. 2005. Preprint.
- [5] L. Arnold. *Stochastic differential equations : theory and applications*. Wiley, 1974.
- [6] A. Aspect, C. Fabre, and G. Grynberg. *Optique quantique 1 : Lasers*. Ecole Polytechnique, 2002. cours de la Majeure de Physique.
- [7] A. Assion, T. Baumert, M. Bergt, T. Brinxner, B. Kiefer, V. Seyfried, M. Strehle, and G. Gerber. *Science*, 282 :919, 1998.
- [8] J.M. Ball, J.E. Marsden, and M. Slemrod. Controllability for distributed bilinear systems. *SIAM Journal of Control and Optimization*, 20(4), 1982.
- [9] C. Bardeen, V. V. Yakovlev, K. R. Wilson, S. D. Carpenter, P. M. Weber, and W. S. Warren. *Chem. Phys. Lett.*, 280 :151, 1997.
- [10] C. J. Bardeen, V. V. Yakovlev, J. A. Squier, and K. R. Wilson. *J. Am. Chem. Soc.*, 120 :13023, 1998.
- [11] C. Bardos, G. Lebeau, and J. Rauch. Sharp sufficient conditions for the observation, control and stabilization of waves from the boundary. *SIAM J. control Opt.*, 30 :1024–1065, 1992.
- [12] R. R. Barton and J.S. Jr. Ivey. Nelder-mead simplex modifications for simulation optimization. *Management Science*, 42(7) :954–973, 1996.
- [13] L. Baudouin and J.P. Puel. Détermination de potentiel dans une équation de Schrödinger à partir de mesures sur une partie du bord. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334 :967–972, 2002.

- [14] L. Baudouin, J.P. Puel, and O. Kavian. Regularity for a Schrodinger equation with singular potentials and application to bilinear optimal control. *Journal of Differential Equations*, 216 :188–222, 2005.
- [15] K. Beauchard. Local controllability of a 1-D Schrödinger equation. *Journal de Mathématique Pures et Appliquées*, 84 :851–956, 2005.
- [16] K. Beauchard, J.-M. Coron, M. Mirrahimi, and P. Rouchon. Implicit Lyapunov control of finite dimensional Schrödinger equations. *System and Control Letters*, 2005. Submitted.
- [17] V.P. Belavkin. Quantum stochastic calculus and quantum nonlinear filtering. *J. Multivariate Anal.*, 42 :171–201, 1992.
- [18] V.P. Belavkin, J. Gauph, and O.G. Smolianov. Hamilton-jacobi-bellman equation for quantum feedback control. *J. Opt. B*, 7 :237–244, 2005.
- [19] A. Bensoussan. *Stochastic control of partially observable systems*. Cambridge University Press, 1992.
- [20] M. Bergt, T. Brinxner, B. Kiefer, M. Strehle, and G. Gerber. *J. Phys. Chem. A.*, 103 :10381, 1999.
- [21] L. Bouten, M. Guță, and H. Maassen. Stochastic Schrödinger equations. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 37 :3189–3209, 2004.
- [22] L. Bouten and R. Van Handel. On the separation principle of quantum control. 2005. preprint ; see <http://arxiv.org/abs/math-ph/0511021>.
- [23] L. Bouten, R. Van Handel, and M.R. James. An introduction to quantum filtering. 2005. In preparation ; see <http://arxiv.org/abs/math-ph/0508006>.
- [24] R. Brockett. Lie theory and control systems defined on spheres. *SIAM Journal of Applied Mathematics*, 25(2) :213–225, 1973.
- [25] R.W. Brockett, C. Rangan, and A.M. Bloch. The controllability of infinite quantum systems. In *Control and Decision Conference, Hawaii*, pages 428–433, 2003.
- [26] P. W. Brummer and M. Shapiro. *Principles of the Quantum Control of Molecular Processes*. Wiley-Interscience, 2003.
- [27] A.G. Butkovskiy and Y.I. Samoilenko. *Control of Quantum-Mechanical Processes and Systems*. Mathematics and its Applications (Soviet Series).
- [28] E. Cancès. *Simulations moléculaire et effets d’environnement : Une perspective mathématique et numérique*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, <http://cermics.enpc.fr/theses/98/Cances.ps> /, 1998.
- [29] E. Cancès, C. Le Bris, and M. Pilot. Contrôle optimal bilinéaire sur une équation de Schrödinger. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences, Paris, Série 1*, 330 :567–571, 2000.
- [30] J. Carr. *Application of Center Manifold Theory*. Springer, 1981.

- [31] Y. Chen, P. Gross, V. Ramakrishna, H. Rabitz, and K. Mease. Competitive tracking of molecular objectives described by quantum mechanics. *J. Chem. Phys.*, 102 :8001–8010, 1995.
- [32] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Mécanique Quantique*, volume I& II. Hermann, Paris, 1977.
- [33] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg. *Photons and Atoms : Introduction to Quantum Electrodynamics*. Wiley, 1989.
- [34] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg. *Atom-Photon interaction : Basic Processes and Applications*. Wiley, 1992.
- [35] J.M. Coron. On the null asymptotic stabilization of the two-dimensional incompressible euler equations in a simply connected domain. *SIAM J. Control Optim.*, 37 :1874–1896, 1999.
- [36] J.M. Coron. Return method : some applications to flow control, September 2000. Université d’Orsay, Paris-Sud.
- [37] J.M. Coron. Local controllability of a 1-d tank containing a fluid modeled by the shallow water equations. *ESAIM : COCV*, 8 :513–554, 2002.
- [38] P. Duchêne and P. Rouchon. Kinetic scheme reduction via geometric singular perturbation techniques. *Chem. Eng. Science*, 51 :4661–4672, 1996.
- [39] E.B. Dynkin. *Markov Processes*, volume I. Springer-Verlag, 1965.
- [40] W. Favoreel, B. De Moor, and P. Van Overschee. Subspace identification of bilinear systems subject to white inputs. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 44(6) :1157–1165, 1999.
- [41] M.D. Feit, J.A. Fleck, and A. Steiger. Solution of the Schrödinger equation by a spectral method. *J. Comput. Phys.*, 47 :412, 1982.
- [42] A. Ferrante, M. Pavon, and G. Raccanelli. Control of quantum systems using model-based feedback strategies. In *Proc. of the International Symposium MTNS’2002*, 2002.
- [43] M. Fliess, J. Lévine, Ph. Martin, and P. Rouchon. Flatness and defect of nonlinear systems : introductory theory and examples. *Int. J. Control*, 61(6) :1327–1361, 1995.
- [44] M. Fliess, J. Lévine, Ph. Martin, and P. Rouchon. A Lie-Bäcklund approach to equivalence and flatness of nonlinear systems. *IEEE AC*, 44 :922–937, 1999.
- [45] J.P. Gauthier. *Structure des Systèmes Non-Linéaires*. Edition du CNRS, 1984.
- [46] J. M. Geremia and H. Rabitz. Optimal hamiltonian identification : The synthesis of quantum optimal control and quantum inversion. *J. Chem. Phys*, 118(12) :5369–5382, 2003.
- [47] J.M. Geremia and H. Rabitz. Optimal identification of hamiltonian information by closed-loop laser control of quantum systems. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :263902–1–4, 2002.

- [48] J.M. Geremia, J.K. Stockton, and H. Mabuchi. Real-time quantum feedback control of atomic spin-squeezing. *Science*, 304 :270, 2004.
- [49] I.I. Gikhman and A.V. Skorkhod. *Introduction to the theory of random processes*. Dover, 1996.
- [50] S. Grivopoulos and B. Bamieh. Lyapounov-based control of quantum systems. In *42nd IEEE Conference on Decision and Control*, 2003.
- [51] P. Gross, H. Singh, H. Rabitz, K. Mease, and G.M. Huang. Inverse quantum-mechanical control : A means for design and a test of intuition. *Phys. Rev. A*, 47 :4593, 1993.
- [52] Peter Gross, Daniel Neuhauser, and Herschel Rabitz. Optimal control of unimolecular reactions in the collisional regime. *J. Chem. Phys.*, 94 :1158–1166, 1991.
- [53] R. Van Handel, J. K. Stockton, and H. Mabuchi. Feedback control of quantum state reduction. *IEEE Trans. Automat. Control*, 50 :768–780, 2005.
- [54] R. Van Handel, J.K. Stockton, and H. Mabuchi. Modeling and feedback control design for quantum state preparation. *J. Opt. B : Quant. Semiclass. Opt. (special issue on quantum control)*, 2005. in press.
- [55] S. Haroche. Contrôle de la décohérence : théorie et expériences, 2004. Notes de cours, Collège de France. <http://www.lkb.ens.fr/recherche/qedcav/college/college.html>.
- [56] R.Z. Has'minskiĭ. *Stochastic stability of differential equations*. Sijthoff & Noordhoff, 1980.
- [57] T. Hornung, M. Motzkus, and R. de Vivie-Reidle. Adapting optimal control theory and using learning loops to provide experimentally feasible shaping mask patterns. *J. Chem. Phys.*, 115 :3105, 2001.
- [58] A. Isidori. *Nonlinear Control Systems*. Springer, New York, 2nd edition, 1989.
- [59] A. Elgart J. E. Avron. Adiabatic theorem without a gap condition. *Commun. Math. Phys.*, 203 :445–463, 1999.
- [60] E.T. Jaynes and F.W. Cummings. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. *Proceedings of the IEEE*, 51(1) :89–109, 1963.
- [61] R. S. Judson and H. Rabitz. *Phys. Rev. Lett.*, 68 :1500, 1992.
- [62] V. Jurdjevic and J.P. Quinn. Controllability and stability. *Journal of Differential Equations*, 28 :381–389, 1978.
- [63] T. Kailath. *Linear Systems*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1980.
- [64] T. Kato. *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer, 1966.
- [65] H.K. Khalil. *Nonlinear Systems*. MacMillan, 1992.
- [66] P.E. Kloeden, E. Platen, and H. Schurz. *Numerical solution of SDE through computer experiments*. Springer-Verlag, 1997.

- [67] R. Kosloff, S.A. Rice, P. Gaspard, Tersigni S., and D.J. Tannor. Wavepacket dancing : Achieving chemical selectivity by shaping light pulses. *Chemical Physics*, (139) :201–220, 1989.
- [68] R.L. Kosut and H. Rabitz. Identification of quantum systems. In *Proceedings of the 15th IFAC World Congress*, 2002.
- [69] S. Kullback. *Information Theory and Statistics*. Wiley, New York, 1959.
- [70] S. Kullback and R.A. Leibler. On information and sufficiency. *Ann. Math. Stat.*, 22 :79–86, 1951.
- [71] H. Kunita. Supports of diffusion processes and controllability problems. In *Intern. Symp. SDE, Kyoto*, pages 163–185, 1978.
- [72] H. Kunita. *Stochastic flows and stochastic differential equations*. Cambridge, 1990.
- [73] H. J. Kushner. *Stochastic Stability and Control*. Academic Press, 1967.
- [74] H. J. Kushner. Stochastic stability. In R.F. Curtain, editor, *Stability of Stochastic Dynamical systems*, volume 294 of *Lecture Notes in Mathematics*, pages 97–123. Springer-Verlag, 1972.
- [75] H.J. Kushner. The concept of invariant set for stochastic dynamical systems and applications to stochastic stability. In H.F.Karremman, editor, *Stochastic Optimization and Control*, pages 47–57. Wiley, 1968.
- [76] C. Le Bris, Y. Maday, and G. Turinici. Towards efficient numerical approaches for quantum control. In *Quantum Control : mathematical and numerical challenges*, pages 127–142. A. Bandrauk, M.C. Delfour, and C. Le Bris, editors, CRM Proc. Lect. Notes Ser., AMS Publications, Providence, R.I., 2003.
- [77] C. Le Bris, M. Mirrahimi, H. Rabitz, and G. Turinici. Hamiltonian identification for quantum systems : well-posedness and numerical approaches. *ESAIM : Control, Optimization and Calculus of Variations*, 2005. Submitted.
- [78] R. J. Levis, G. Menkir, and H. Rabitz. *Science*, 292 :709, 2001.
- [79] H.R. Lewis and W.B. Riesenfeld. An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field. *J. Math. Phys.*, 10 :1458, 1969.
- [80] B. Li, G. Turinici, V. Ramakrishna, and H. Rabitz. Optimal dynamic discrimination of similar molecules through quantum learning control. *J. Phys. Chem. B.*, 106(33) :8125–8131, 2002.
- [81] Z.-M. Lu and H. Rabitz. Unified formulation for control and inversion of molecular dynamics. *J. Phys. Chem.*, 99 :13731–13735, 1995.
- [82] H. Mabuchi and N. Khaneja. Principles and applications of control in quantum systems. 2005. submitted, <http://minty.caltech.edu/Publications/pracqsys.pdf>.

- [83] Y. Maday and G. Turinici. New formulations of monotonically convergent quantum control algorithms. *J. Chem. Phys.*, 118(18), 2003.
- [84] X. Mao. Stochastic versions of lasalle theorem. *J. Diff. Eq.*, 153 :175–195, 1999.
- [85] André Martinez. Precise exponential estimates in adiabatic theory. *J. Math. Phys.*, 35(B), 1994.
- [86] E. Merzbacher. *Quantum mechanics*. Wiley, third edition, 1998.
- [87] A. Messiah. *Quantum Mechanics*, volume I&II. North Holland Publ. Co., Amsterdam, 1962.
- [88] M. Mirrahimi and R. Van Handel. Stabilizing feedback controls for quantum systems. *SIAM Journal of Control and Optimization*, 2005. Submitted.
- [89] M. Mirrahimi, R. Van Handel, A. Miller, and H. Mabuchi. Controlled generation of two-qubit entangled states. 2005. In preparation.
- [90] M. Mirrahimi and P. Rouchon. Controllability of quantum harmonic oscillators. *IEEE Trans. Automatic Control*, 49(5) :745–747, 2004.
- [91] M. Mirrahimi and P. Rouchon. Trajectory generation for quantum systems based on lyapounov techniques. In *Proc. of IFAC Symposium NOLCOS'2004*, 2004.
- [92] M. Mirrahimi and P. Rouchon. Trajectory tracking for quantum systems : a lyapounov approach. In *Proc. of the International Symposium MTNS'2004*, 2004.
- [93] M. Mirrahimi and P. Rouchon. Feedback control of lindblad master equations with two time scales. Technical Report A/339, École des Mines de Paris, Centre Automatique et Systèmes, 2005.
- [94] M. Mirrahimi and P. Rouchon. On the controllability of some quantum electro-dynamical systems. In *Proc. of the 44th IEEE Conf. on Decision and Control*, 2005. accepted.
- [95] M. Mirrahimi, P. Rouchon, and G. Turinici. Lyapunov control of bilinear Schrödinger equations. *Automatica*, 41 :1987–1994, 2005.
- [96] M. Mirrahimi, G. Turinici, and P. Rouchon. Reference trajectory tracking for locally designed coherent quantum controls. *J. of Physical Chemistry A*, 109 :2631–2637, 2005.
- [97] Y. Ohtsuki, H. Kono, and Y. Fujimura. Quantum control of nuclear wave packets by locally designed optimal pulses. *J. Chem. Phys.*, 109(21) :9318–9331, 1998.
- [98] B. Oksendal. *Stochastic differential equations*. Springer, sixth edition, 2003.
- [99] A. Pazy. *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*, volume 44 of *Appl. Math. Sci.* Springer, 1983.
- [100] N. Petit and P. Rouchon. Dynamics and solutions to some control problems for water-tank systems. *IEEE AC*, 47(4) :594–609, 2002.

- [101] Minh Q. Phan and Herschel Rabitz. Learning control of quantum-mechanical systems by laboratory identification of effective input-output maps. *Chem. Phys.*, 217 :389–400, 1997.
- [102] Minh Q. Phan and Herschel Rabitz. A self-guided algorithm for learning control of quantum-mechanical systems. *J. Chem. Phys.*, 110 :34–41, 1999.
- [103] P.E. Protter. *Stochastic integration and differential equations*. Springer, second edition, 2004.
- [104] H. Rabitz. Perspective. shaped laser pulses as reagents. *Science*, 299 :525–527, 2003.
- [105] H. Rabitz, R. de Vivie-Riedle, M. Motzkus, and K. Kompa. Whither the future of controlling quantum phenomena? *Science*, 288 :824–828, 2000.
- [106] H. Rabitz, M. Smit, and W. Zhu. Managing singular behavior in the tracking control of quantum dynamical observables. *J. Chem. Phys.*, 110 :1905, 1999.
- [107] H. Rabitz, G. Turinici, and E. Brown. Control of quantum dynamics : Concepts, procedures and future prospects. In Ph. G. Ciarlet, editor, *Computational Chemistry*, volume X. Elsevier Science B.V., 2003. Special Volume (C. Le Bris Editor) of Handbook of Numerical Analysis.
- [108] H. Rabitz and W. Zhu. Quantum control design via adaptive tracking. *J. Chem. Phys.*, 119(7), 2003.
- [109] V. Ramakrishna, M. Salapaka, M. Dahleh, and H. Rabitz. Controllability of molecular systems. *Phys. Rev. A*, 51(2) :960–966, 1995.
- [110] S. Rice and M. Zhao. *Optimal Control of Quantum Dynamics*. Wiley, 2000. many additional references to the subjects of this paper may also be found here.
- [111] P. Rouchon. Control of a quantum particle in a moving potential well. In *IFAC 2nd Workshop on Lagrangian and Hamiltonian Methods for Nonlinear Control*, April 2003.
- [112] J. Salomon. *Contrôle en chimie quantique : conception et analyse de schémas d’optimisation*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2005.
- [113] S. G. Schirmer, H. Fu, and A. I. Solomon. Complete controllability of quantum systems. *Phys. Rev. A*, 63(063410), 2001.
- [114] S.G. Schirmer, M.D. Girardeau, and J.V. Leahy. Efficient algorithm for optimal control of mixed-state quantum systems. *Phys. Rev. A*, 61 :012101, 2000.
- [115] N. Shenvi, J.M. Geremia, and H. Rabitz. Nonlinear kinetic parameter identification through map inversion. *J. Phys. Chem. A*, 106 :12315–12323, 2002.
- [116] A. Silberfarb, P.S. Jessen, and I.H. Deutsch. Quantum state reconstruction via continuous measurement. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :030402, 2005.
- [117] L.M. Silverman and H.e. Meadows. Controllability and observability in time-variable linear systems. *SIAM J. Control*, 5 :64–73, 1967.

- [118] D.A. Steck, K. Jacobs, H. Mabuchi, T. Bhattacharya, and S. Habib. Quantum feedback control of atomic motion in an optical cavity. 2003. preprint : <http://arxiv.org/abs/quant-ph/0310153>.
- [119] J.K. Stockton, R. Van Handel, and H. Mabuchi. Deterministic dicke state preparation with continuous measurement and control. *Phys. Rev. A*, 70 :022106, 2004.
- [120] D. W. Stroock and S. R. Varadhan. On the support of diffusion processes with applications to the strong maximum principle. In *Proc. 6-th Berkely Sympos. Math. Statist prob.*, volume III, pages 333–368, 1972.
- [121] M. Sugawara. General formulation of locally designed coherent control theory for quantum systems. *J. Chem. Phys.*, 118(15) :6784–6800, 2003.
- [122] M. Sugawara and Y. Fujimura. Control of quantum dynamics by a locally optimized laser field. application to ring puckering isomerization. *J. Chem. Phys.*, 100 :5646–5655, 1993.
- [123] H.J. Sussmann and V. Jurdjevic. Controllability of nonlinear systems. *J. Differential Equations*, 12 :95–116, 1972.
- [124] M. Tadi and H. Rabitz. Explicit method for parameter identification. *J. Guid., Control, Dynam.*, 20 :486–491, 1997.
- [125] D. Tannor, V. Kazakov, and V. Orlov. Control of photochemical branching : Novel procedures for finding optimal pulses and global upper bounds. In J. Broeckhove and L. Lathouwers, editors, *Time Dependent Quantum Molecular Dynamics*, pages 347–360. Plenum, 1992.
- [126] Samuele Tersigni, Pierre Gaspard, and A. Rice. On using shaped light pulses to control the selectivity of product formation in a chemical reaction : An application to a multiple level system. *J. Chem. Phys.*, 93(3) :1670–1680, 1990.
- [127] G. Turinici. *Analyse de méthodes numériques de simulation et contrôle en chimie quantique*. PhD thesis, Université Paris Sud, <http://www-rocq.inria.fr/Gabriel.Turinici/>, 2000.
- [128] G. Turinici. Controllable quantities for bilinear quantum systems. In *Proceedings of the 39th IEEE Conference on Decision and Control*, pages 1364–1369, 2000.
- [129] G. Turinici. On the controllability of bilinear quantum systems. In C. Le Bris and M. Defranceschi, editors, *Mathematical models and methods for ab initio Quantum Chemistry*, volume 74 of *Lecture Notes in Chemistry*. Springer, 2000.
- [130] G. Turinici and H. Rabitz. Quantum wavefunction controllability. *Chem. Phys.*, 267 :1–9, 2001.
- [131] G. Turinici and H. Rabitz. Wavefunction controllability in quantum systems. *J. Phys. A*, 36 :2565–2576, 2003.
- [132] P. Vettori. On the convergence of a feedback control strategy for multilevel quantum systems. In *Proc. of the International Symposium MTNS'2002*, 2002.

- [133] H.M. Wiseman. Quantum theory of continuous feedback. *Physical Review A*, 49 :2133–50, 1994.
- [134] X. Zhang and E. Zuazua. Controllability of nonlinear partial differential equations. In *Proceedings of the Second IFAC Workshop on Lagrangian and Hamiltonian methods in Nonlinear Control*, Sevilla, 2003.
- [135] W. Zhu and H. Rabitz. *J. Chem. Phys.*, 109 :385, 1998.
- [136] W. Zhu and H. Rabitz. Potential surfaces from the inversion of time dependent probability density data. *J. Chem. Phys.*, 111 :472–480, 1999.
- [137] E. Zuazua. Remarks on the controllability of the Schrödinger equation. In A. Bandrauk, M.C. Delfour, and C. Le Bris, editors, *Quantum Control : mathematical and numerical challenges*, CRM Proc. Lect. Notes Ser., pages 181–199, Providence, 2003. AMS Publications.