Contrôle optimal de la dynamique des spins : applications en résonance magnétique nucléaire et information quantique

Léo van Damme

▶ **To cite this version:**

Léo van Damme. Contrôle optimal de la dynamique des spins : applications en résonance magnétique nucléaire et information quantique. Physique Quantique [quant-ph]. Université de Bourgogne, 2016. Français. NNT : 2016DIJOS045 . tel-01635645

HAL Id: tel-01635645
https://theses.hal.science/tel-01635645

Submitted on 15 Nov 2017

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

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

Université de Bourgogne – Franche Comté

THÈSE

pour obtenir le grade de docteur en physique

présentée par

Léo Van Damme

le 14 octobre 2016

Contrôle optimal de la dynamique des spins:

Applications en Résonance Magnétique Nucléaire et en Information Quantique

---

Directeur de thèse : **Dominique Sugny**

Jury:

A. Keller,	Professeur	Rapporteur
T. Chambrion,	Maître de conférences	Rapporteur
S. Guérin,	Professeur	Examinateur
P. Mardešić,	Maître de conférences	Examinateur
M. Picquet,	Maître de conférences	Examinateur
G. Montemezzani,	Professeur	Examinateur
T. Chanelière,	Chargé de recherche CNRS	Examinateur

Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne
UMR 6303 CNRS
BP 47870 – 21078 Dijon – France

Remerciements

Je tiens à remercier en premier lieu Dominique Sugny, mon directeur de thèse, pour m'avoir encadré sans relâche tout au long de mon doctorat y compris lors de la rédaction de mon manuscrit. Cela m'a permis d'acquérir une véritable formation et de maîtriser de nombreux outils mathématiques performants comme la théorie du contrôle optimal et tout l'outillage Hamiltonien associé, pour les appliquer sur des modèles physiques qui peuvent être très théoriques mais aussi réalistes et démontrés expérimentalement.

Merci à Pavao Mardešić d'avoir fait appel à moi sur le problème de la raquette de tennis, un problème que l'on n'aurait pas pu mieux résoudre et qui a suscité des périodes de réflexion et des échanges agréables.

Je remercie également Stéphane Guérin pour les différentes conversations qu'on a pu avoir au cours de notre collaboration et pour son soutien.

D'une manière plus générale, je remercie tous les collègues du laboratoire grâce à qui j'ai passé trois années paisibles à Dijon, ainsi que les personnes que j'ai rencontrées lors de mon séjour à Munich.

Enfin, merci aux membres du jury de s'être déplacés pour ma soutenance et d'avoir corrigé quelques erreurs de ce manuscrit.

Table des matières

Introduction générale **9**

1 Introduction au contrôle quantique **15**
1.1 Contexte . . . 15
1.2 Introduction à la Résonance Magnétique Nucléaire . . . 16
1.2.1 Modèle physique . . . 16
1.2.2 Effet des inhomogénéités . . . 22
1.2.3 Contrôle optimal en Résonance Magnétique Nucléaire . . . 25
1.3 Introduction à l'information quantique . . . 26
1.3.1 Information classique . . . 26
1.3.2 Portes quantiques à un qubit . . . 26
1.3.3 Portes à deux qubits . . . 31
1.3.4 Ensemble universel de portes . . . 31

2 Méthodes mathématiques **33**
2.1 Introduction . . . 33
2.2 Problème de contrôle optimal . . . 34
2.3 Principe du maximum de Pontryagin . . . 36
2.4 Contrôle géométrique . . . 37
2.4.1 Contrôle en énergie minimum . . . 37
2.4.2 Contrôle en temps minimum . . . 42
2.4.3 Points de coupure et points conjugués . . . 43
2.5 Contrôle numérique . . . 44
2.5.1 Introduction . . . 44
2.5.2 Méthode du gradient . . . 46
2.5.3 Algorithme GRAPE . . . 47
2.5.4 Optimisation de fonctions paramétrées . . . 53
2.6 Solide en rotation . . . 54
2.6.1 Équation générale . . . 54
2.6.2 Angles d'Euler . . . 55
2.6.3 Matrices de rotation . . . 57
2.6.4 La toupie d'Euler . . . 57

3 Contrôle optimal géométrique sur une chaîne de spins couplés 61
3.1 Introduction . . . 61
3.2 Modèle . . . 63
3.3 Calcul des contrôles optimaux . . . 66
3.3.1 Application du Principe du Maximum de Pontryagin . . . 66
3.3.2 Dynamique optimale . . . 67
3.3.3 Expression des contrôles . . . 69
3.4 Intégration des trajectoires . . . 69
3.4.1 Angles d'Euler . . . 69
3.4.2 Solution du problème . . . 71
3.5 Champ de contrôle $u(t)$ . . . 72
3.6 Cas des couplages égaux . . . 73
3.7 Extension pour une chaîne de quatre spins . . . 74
3.8 Conclusion . . . 75
3.9 Démonstration des différentes propositions . . . 76

4 L'effet de la raquette de Tennis 81
4.1 Introduction . . . 81
4.2 Modèle et choix des angles d'Euler . . . 83
4.3 Moment cinétique . . . 85
4.4 Dynamique générale . . . 89
4.5 Théorème de la raquette de tennis . . . 91
4.6 Analyse numérique . . . 95
4.7 Étude de différents objets . . . 95
4.8 Conclusion . . . 98
4.9 Démonstration du théorème de la raquette de Tennis . . . 98

5 La toupie d'Euler et le spin quantique 103
5.1 Introduction . . . 103
5.2 Modèle . . . 105
5.3 Inversion de population . . . 108
5.3.1 Intégration des trajectoires . . . 108
5.3.2 Champs de contrôle . . . 110
5.3.3 Efficacité et robustesse de l'inversion de population . . . 113
5.4 Transformations unitaires . . . 118
5.4.1 Calcul des champs de contrôles . . . 118
5.4.2 Phase globale . . . 119
5.4.3 Portes quantiques . . . 121
5.4.4 Effet de la raquette de tennis quantique . . . 123
5.4.5 Réalisation expérimentale . . . 126
5.5 Phase de Montgomery . . . 130

5.6 Conclusion du chapitre . . . 135

6 Contrôle optimal numérique: Application en information quantique 137
6.1 Introduction . . . 137
6.2 Modèle et méthode . . . 140
6.3 Optimisation numérique . . . 146
6.4 Application expérimentale . . . 152
6.4.1 Choix du champ de contrôle . . . 152
6.4.2 Réalisation expérimentale . . . 154
6.5 Optimisation de pulses composites . . . 157
6.6 Algorithme . . . 161
6.7 Conclusion . . . 165

7 Conclusion et perspectives 167
7.1 Résumé des différents résultats . . . 167
7.2 Perspectives . . . 170

Annexe 173

A Fonctions elliptiques de Jacobi et intégrales elliptiques 175
A.1 Fonctions elliptiques de Jacobi . . . 175
A.1.1 Construction . . . 175
A.1.2 Propriétés . . . 177
A.2 Intégrales elliptiques . . . 178
A.2.1 Intégrale elliptique de première espèce . . . 178
A.2.2 Intégrale elliptique de deuxième espèce . . . 179
A.2.3 Intégrale elliptique de troisième espèce . . . 179

B Problèmes ouverts 181
B.1 Méthode analytique optimale pour les pulses composites . . . 181
B.1.1 Modèle . . . 181
B.1.2 Cas d'une porte NOT . . . 182
B.1.3 Optimisation d'un profil de robustesse en forme de croix . . . 183
B.1.4 Application pour un composite 5π . . . 184
B.1.5 Questions ouvertes . . . 186
B.2 La toupie d'Euler avec dérive . . . 188
B.2.1 Modèle . . . 188
B.2.2 Phase géométrique . . . 190
B.2.3 Intégration des trajectoires . . . 192
B.2.4 Questions ouvertes . . . 193

Introduction générale

La dynamique de n'importe quel objet physique est entièrement déterminée par ses conditions initiales et son environnement. Dans un système qui n'est pas contrôlé, l'Homme est un observateur et il ne peut pas intervenir sur la dynamique. Dans le meilleur des cas, il peut choisir des conditions initiales, mais il n'affecte pas le système durant son évolution. En revanche, dans un système contrôlé, l'Homme est aussi acteur. Il peut agir sur l'évolution de l'objet au moyen d'une commande. Concrètement, la dynamique d'un tel système dépend d'une ou plusieurs variables de contrôle. Il existe principalement deux classes de contrôles: les contrôles en boucle fermée, qui s'adaptent à l'état du système à un instant t, et les contrôles en boucle ouverte qui sont déterminés *a priori* [1]. Il est important de noter que le contrôle en boucle fermée nécessite de connaître l'état du système à l'instant t pour adapter le contrôle ce qui implique une mesure du système. De manière générale, un problème de contrôle consiste à manipuler la dynamique d'un système de sorte que ce dernier soit transféré d'un certain état initial vers un état cible donné. Il s'agit de paramétrer les variables de contrôle de sorte que le transfert soit réalisé. Une question primordiale est de se demander si le système est contrôlable, c'est-à-dire s'il existe des contrôles qui permettent de transférer le système vers un état cible [2]. Pour illustrer tous ces concepts, prenons l'exemple simple d'une voiture. L'objet est la voiture avec toutes ses caractéristiques, volant, freins, accélérateur... S'il n'y a pas de conducteur, le système est simplement l'ensemble route + air et la voiture n'est pas contrôlée. Elle se meut selon la courbure de la route. Si on rajoute un conducteur, alors le système est contrôlé et les variables de contrôle sont l'angle du volant, la pédale de frein et l'accélérateur. Le chauffeur peut agir sur ces variables. Supposons que l'on souhaite partir de Paris (état initial) pour aller à Grenoble (état cible). Si le conducteur fait attention à la route, qu'il tourne quand il doit tourner, qu'il évite des obstacles imprévus, alors il s'agit d'un système contrôlé en boucle fermée. Autrement dit, les commandes du véhicule à l'instant t sont paramétrées en fonction de la position du véhicule (l'état du système) au même instant t. Le système sera contrôlé en boucle ouverte si, avant de partir, le conducteur reçoit des consignes strictes concernant les commandes du véhicule, en particulier lorsqu'il devra freiner, accélérer et tourner, et qu'il applique bêtement ces consignes sans regarder la route. Les commandes du véhicule sont alors paramétrées directement en fonction du temps. Supposons maintenant qu'il y ait une côte sur la route. Si la côte est de pente raisonnable, la voiture pourra la franchir et arriver à Grenoble. Le système est alors contrôlable. Si la pente est trop

abrupte, la voiture ne pourra pas la franchir, soit parce qu'elle n'est pas assez puissante, ou parce que la pente est tellement forte que la voiture bascule en arrière... Dans ce cas, le système n'est pas contrôlable et il est impossible d'aller à Grenoble quelque soit le contrôle appliqué.

En général, lorsque le système est contrôlable [2, 3], il existe une infinité de paramétrisations possibles des contrôles pour réaliser le transfert. La théorie du contrôle optimal [4, 5, 6, 7, 8] permet de sélectionner, parmi cette infinité de contrôles, ceux qui minimisent un coût bien défini. Elle a été développée à la fin des années 1950 par L. S. Pontryagin. Elle est fondée sur le calcul variationnel [9], qui est apparu en 1696 avec le problème du brachistochrone de Jean Bernoulli et qui a été publié en latin dans les *Acta Eruditorum* [10].

La théorie du contrôle optimal apparaît dans un contexte aérospatial à la fin des années 50, pour la mise en orbite de Spoutnik [11], le premier satellite artificiel de la Terre. On la retrouve aujourd'hui dans un grand nombre de domaines comme l'aérospatiale, la biologie, la chimie, la mécanique quantique, et même dans des domaines encore plus éloignés comme la finance. Dans ce manuscrit, nous nous concentrerons sur le contrôle quantique. Notons qu'en mécanique quantique, le contrôle en boucle fermée est délicat puisqu'il est difficile d'acquérir de l'information sur l'état du système sans le modifier [12]. Cela est tout de même possible et a été démontré expérimentalement par l'équipe de S. Haroche en 2011 [13]. Il existe aussi des méthodes de contrôle basées sur les fonctions de Lyapunov qui consistent à simuler un système artificiel en boucle fermée, puis à se servir des contrôles obtenus en boucle ouverte [14, 15]. Nous ne considérerons dans la suite que des problèmes en boucles ouvertes qui sont majoritairement utilisés en mécanique quantique. Historiquement, la chimie quantique a été un domaine précurseur où de nombreuses méthodes de contrôle ont été introduites. En 1985, D. J. Tannor et S. A. Rice introduisent pour la première fois des techniques de contrôle optimal en mécanique quantique pour des problèmes de contrôle de réactions chimiques [16]. Le contrôle quantique concerne aujourd'hui beaucoup d'autres domaines allant de l'informatique quantique [17, 18], la cryptographie quantique [19], la résonance magnétique nucléaire [20, 21], l'imagerie par résonance magnétique [22] à l'optique quantique [23]. Il y a deux manières de s'attaquer à un problème de contrôle optimal. Lorsque le système est de dimension raisonnable, on peut envisager de le résoudre analytiquement ou via une analyse géométrique [2, 5, 8]. On parle alors de contrôle géométrique. On déduit les lois de contrôle grâce au Principe du Maximum de Pontryagin (PMP). En mécanique quantique, on considère généralement des systèmes de grande dimension, pour lesquels le contrôle géométrique n'est pas envisageable. Il faut donc utiliser des méthodes d'optimisation numérique qui permettent de trouver un optimum local [24, 25]. De nombreux algorithmes ont été développés dans ce cadre comme les méthodes de Krotov [26] ou les algorithmes du gradient [25]. Elles sont de plus en plus performantes grâce aux améliorations des ordinateurs et permettent aujourd'hui de tenir compte des contraintes et des imperfections expérimentales. L'ensemble

de ces algorithme permet de traiter presque tous les problèmes de contrôle quantique.

Nous allons utiliser dans cette thèse des méthodes de contrôle optimal à la fois géométriques et numériques sur différents systèmes quantiques couramment étudiés dans la littérature. Cette thèse comporte plusieurs résultats expérimentaux sur le contrôle des spins réalisés en Résonance Magnétique Nucléaire (RMN). Les résultats théoriques sont obtenus dans le cadre de l'information quantique et de la Résonance Magnétique Nucléaire. Ils pourraient être appliqués dans d'autres domaines comme l'imagerie par résonance magnétique. Cette thèse consiste non seulement à déterminer des lois de commande permettant de manipuler au mieux la dynamique des systèmes quantiques étudiés mais aussi d'analyser et de comprendre les mécanismes de contrôle utilisés. Ceci est crucial d'un point de vue expérimental pour avoir une intuition physique sur les lois de contrôle à mettre au point. Cela permet, entre autre, de construire des champs de contrôle robustes par rapport aux imperfections expérimentales. Cet aspect est très important pour des système contrôlés en boucle ouverte car cela permet de déterminer des contrôles destinés à être directement implémentés avec des dispositifs expérimentaux.

Détaillons à présent les différents chapitres de ce manuscrit. Le premier chapitre a pour but de présenter les différents domaines physiques dans lesquels les techniques de contrôle optimal seront appliquées. On introduit brièvement le phénomène de Résonance Magnétique Nucléaire ainsi que les équations de Bloch, qui seront étudiées tout au long du manuscrit. Certains concepts fondamentaux en information quantique comme le bit quantique et les portes quantiques sont également rappelés.

Le chapitre 2 introduit les méthodes mathématiques sur lesquelles sont fondés tous les résultats de ce manuscrit. On commence par présenter un problème général de contrôle optimal, puis on expose le principe du maximum de Pontryagin (PMP). Ce chapitre se poursuit avec une section consacrée aux méthodes numériques de contrôle optimal. Un algorithme particulièrement performant dans le contexte du contrôle quantique appelé GRAPE est présenté en détail. Dans la dernière partie de ce chapitre, on introduit les matrices de rotations du groupe $SO(3)$. On présente aussi la toupie d'Euler, dont la dynamique sera étudiée à plusieurs reprises au cours du manuscrit.

Dans le chapitre 3, le PMP est appliqué au contrôle d'une chaîne de trois spins inégalement couplés. Le mécanisme de contrôle est complètement décrit de façon géométrique, ce qui permet de déterminer le temps minimum théorique pour transférer la chaîne de spins d'un état initial à un état cible.

Le quatrième chapitre est consacré à l'étude d'un phénomène de physique classique appelé *l'effet de la raquette de Tennis*. C'est un effet célèbre qui apparaît dans la dynamique d'un corps solide en rotation gouvernée par les équations d'Euler. Nous présentons les conditions que doit satisfaire le solide pour que cet effet soit observé en pratique.

Les équations d'Euler sont une solution particulière du problème de contrôle d'un système quantique à deux niveaux d'énergie. Cette solution est étudiée dans le chapitre 5. Elle permet d'expliquer géométriquement un certain nombre de solutions célèbres comme

la solution d'Allen-Eberly [27, 28, 29, 30] ainsi que d'exploiter une phase quantique analogue à la phase de Berry [31, 32] appelée la phase de Montgomery [33, 34]. L'effet de la raquette de tennis s'applique au contrôle d'un système quantique à deux niveaux et est associé à une porte quantique particulière (la porte NOT). Cette solution est appelée *l'effet de la raquette de tennis quantique*. Elle a été implémentée expérimentalement par l'équipe de S. J. Glaser à Munich.

Dans le sixième chapitre, on applique l'algorithme numérique GRAPE au problème du contrôle robuste d'un ensemble de spins. Le but est de trouver des contrôles qui permettent de transférer le système d'un état initial vers un état cible malgré la présence d'inhomogénéités sur les champs de contrôle. L'idée est d'optimiser des champs de contrôle ayant une forme analytique prédéfinie basée sur le concept de "raccourci adiabatique" [35, 36]. L'optimisation numérique permet d'obtenir une solution efficace tout en conservant la paramétrisation calculée au préalable, afin de garder une interprétation physique des mécanismes de contrôle. Ce champ de contrôle a été utilisé expérimentalement dans l'équipe de T. Halfmann à Darmstadt en Allemagne.

Le chapitre 7 conclut ce manuscrit en rappelant tous les résultats obtenus. On donne aussi les différentes perspectives possibles qui suivent ce travail. Plusieurs problèmes ouverts et partiellement résolus sont proposés dans l'appendice B. L'appendice A rappelle les propriétés essentielles des fonctions elliptiques de Jacobi.

Ces trois années de recherche ont conduit à la publication des articles suivants:

— L. Van Damme, R. Zeier, S. J. Glaser and D. Sugny, **Application of the Pontryagin maximum principle to the time-optimal control in a chain of three spins with unequal couplings**, *Physical Review A* 90, 013409 (2014)
Résumé: Nous avons appliqué le principe du maximum de Pontryagin afin de contrôler l'état d'une chaîne de trois spins couplés selon le modèle d'Ising quantique. Le Hamiltonien de Pontryagin est identique à celui d'une toupie d'Euler, ce qui nous a permis d'intégrer complètement le système et d'en déduire une description géométrique des solutions. Le temps minimum pour transférer la chaîne d'un état initial vers un état cible est donné en fonction des constantes de couplage inter-spins.

— L. Van Damme, P. Mardešić, D. Sugny **The tennis racket effect**, *à paraître dans Physica D* (2016).
Résumé: L'effet de la raquette de tennis est un mouvement particulier qu'effectue une raquette de tennis que l'on jette dans l'espace. Plus généralement, cet effet concerne n'importe quel solide en rotation libre à condition que celui-ci ait une géométrie particulière. Nous avons pu déterminer dans cet article toutes les propriétés qui sont responsables de cet effet, à savoir les conditions initiales de la dynamique

ainsi que la géométrie du solide. Nous avons pu énoncer formellement le *théorème de la raquette de tennis* à travers une formule analytique relativement simple.

— L. Van Damme, D. Leiner, P. Mardešić, S. J. Glaser and D. Sugny, **The quantum tennis racket effect: Linking the rotation of a rigid body to the Schrödinger equation** *Soumis à Nature Physics.*
RÉSUMÉ: La dynamique d'une particule de spin 1/2 soumise à des champs magnétiques est analogue à celle d'une toupie d'Euler. Les champs de contrôle du système quantique et la vitesse angulaire de la toupie jouent le même rôle, à l'exception que dans ce dernier cas la vitesse de rotation est entièrement déterminée par les paramètres du problème. En considérant que les champs de contrôle du système quantique sont les composantes du vecteur vitesse angulaire d'une toupie, les deux systèmes sont parfaitement équivalents. Cela nous a permis de déterminer différentes familles de champs de contrôle et d'en expliquer les propriétés par des arguments purement géométriques. Nous avons mis en pratique *l'effet de la raquette de tennis quantique* sur un dispositif expérimental. Un aspect particulier appelé *phase de Montgomery* a été utilisé pour mettre en œuvre des portes phases géométriques.

— L. Van Damme and D. Schraft and G. T. Genov and D. Sugny and T. Halfmann and S. Guérin, **Robust NOT-gate by single-shot shaped pulses: Demonstration by rephasing of atomic coherences** *Soumis à Physical Review Letters.*
RÉSUMÉ: Nous avons mis en œuvre dans cet article une méthode de contrôle optimal numérique qui permet d'améliorer la robustesse d'une porte NOT avec des champs de contrôle contraints de garder une certaine forme analytique. Les champs dépendent ainsi d'un petit nombre de paramètres. Les résultats suggèrent que seulement huit paramètres sont suffisants pour que les contrôles soient robustes. La méthode à été démontrée expérimentalement.

Chapitre 1

Introduction au contrôle quantique

1.1 Contexte

La théorie du contrôle quantique s'est rapidement développée durant ces trente dernières années [37, 38]. Elle consiste à contrôler l'état des systèmes quantiques, principalement avec des lasers ou des champs magnétiques. Les principaux domaines concernés sont le contrôle de réactions chimiques par champs laser [39], dont les premières applications expérimentales sont apparues dans les année 70 [40], la résonance magnétique nucléaire (RMN) [20, 21] développée en 1946 par F. Bloch et E. Purcell, et toutes les applications qui concernent l'information quantique et le calcul quantique [17, 18, 19]. Les techniques de contrôle quantique sont également très efficaces en optique quantique [12]. Un des but principaux de la théorie du contrôle quantique est de développer des méthodes permettant de déterminer systématiquement des lois de contrôles adaptées, ce qui n'est pas facile en raison des propriétés particulières des systèmes quantiques comme les problèmes liés à la mesure ou à l'intrication quantique [12]. Dans ce manuscrit, nous appliquerons notamment des méthodes de contrôle en résonance magnétique nucléaire (RMN), domaine dans lequel de nombreuses stratégies de contrôle ont déjà été mises en œuvre grâce à la progression rapide de la technologie [38, 41]. Le principe est de déterminer des impulsions magnétiques pour préparer un échantillon dans un certain état afin de mesurer sa réponse et d'en déduire des informations sur la nature des atomes voisins comme les liaisons chimiques, la structure moléculaire, les distances entre les atomes, etc [20]. Aujourd'hui encore, la plupart de ces impulsions magnétiques sont calculées avec des méthodes intuitives ou adiabatiques [42]. Les méthodes intuitives nécessitent une bonne compréhension de la dynamique pour développer des lois de contrôle avec des arguments relativement simples. Les méthodes adiabatiques sont fondées sur la théorie adiabatique, selon laquelle un système quantique reste dans un état propre si le processus de contrôle est infiniment lent [43]. Nous verrons sur différents exemples l'efficacité et l'utilité des méthodes de contrôle optimal sur ces systèmes. Différentes applications en information quantique, comme les opérations logiques, seront également développées dans ce chapitre.

1.2 Introduction à la Résonance Magnétique Nucléaire

1.2.1 Modèle physique

La RMN est un phénomène qui apparaît pour certains atomes possédant un spin nucléaire, propriété purement quantique de certaines particules. Le concept de spin a été élaboré par Samuel Goudsmit et George Uhlenbeck en 1925 [44]. Le terme spin vient lui même d'une erreur d'interprétation des systèmes atomiques. En effet, dans la vision classique où un électron tourne autour du noyau sur une orbite circulaire ou elliptique, le spin correspond au moment cinétique de l'électron dû à sa rotation propre (d'où le terme *spin*: tourner, en anglais). Cependant, cette conception a été très vite abandonnée, car elle ne permettait pas d'expliquer certains résultats expérimentaux comme l'effet Zeeman ou l'expérience de Stern et Gerlach (1922) [45]. Une vision moderne du spin est de considérer le moment cinétique de spin $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ comme un opérateur qui a les mêmes propriétés que les autres moments cinétiques quantiques, comme le moment cinétique orbital. Ses composantes S_x, S_y et S_z vérifient des relations de commutations analogues au moment cinétique classique qui sont:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x, \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y, \quad [S^2, S_k] = 0, \tag{1.1}$$

avec $k = x$, y ou z. Il existe une base propre $\{|s, m\rangle\}$ commune aux opérateurs S^2 et S_z, où s est entier ou demi-entier et où m est tel que $-s \leq m \leq s$. Dans cette base, l'opérateur de spin vérifie:

$$S^2 |s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m\rangle , \quad S_z |s, m\rangle = m\hbar |s, m\rangle . \tag{1.2}$$

Le noyau de l'atome d'hydrogène, qui est le plus utilisé en RMN, possède un spin 1/2. La RMN nécessite la manipulation de ce spin grâce à des champs magnétiques. Précisons tout d'abord qu'une particule chargée possédant un spin induit un moment magnétique, le *moment magnétique de spin*, noté $\vec{M}$, qui est l'observable que l'on utilise en RMN. Ainsi, un proton tel que le noyau d'hydrogène peut être assimilé à un petit aimant que l'on va manipuler grâce à des champs magnétiques. On travail en pratique sur des échantillons de taille macroscopique. L'observable $\vec{M}$ correspond alors à la somme des moments magnétiques de chacune des particules de l'échantillon, et s'appelle l'aimantation.

Pour manipuler la dynamique du moment magnétique $\vec{M}$, on utilise deux champs magnétiques [20]. Le premier est un champ constant très intense (23.5 Teslas pour le spectromètre le plus puissant [46]) polarisé par convention dans la direction $\vec{u}_Z$ du repère du laboratoire. On le note $\vec{B}_0$. Il est responsable de l'effet Zeeman qui lève la dégénérescence des niveaux quantiques [45]. Ce champ implique la précession du moment magnétique $\vec{M}$ autour de l'axe $\vec{u}_Z$, connue sous le nom de précession de Larmor. La fréquence de précession est donnée par $\omega_0 = \gamma B_0$, où γ est le rapport gyromagnétique. Le second est un champ radio-fréquence beaucoup moins intense, polarisé dans une direction du plan

$(\vec{u}_X, \vec{u}_Y)$. C'est ce champ que l'on va chercher à mettre en forme et à optimiser pour manipuler le vecteur $\vec{M}$, en modifiant son amplitude et sa direction. Il sera donc utilisé comme contrôle. On le note $\vec{B}_1$. Les champs magnétiques $\vec{B}_0$ et $\vec{B}_1$ s'écrivent sous la forme:

$$\vec{B}_0 = B_0\vec{u}_Z, \quad \vec{B}_1 = B_{1X}(t)\cos(\omega t)\vec{u}_X + B_{1Y}(t)\cos(\omega t + \varphi)\vec{u}_Y. \tag{1.3}$$

La dynamique du vecteur $\vec{M}$ sous l'influence de ces deux champs est donnée par les *équations de Bloch*, que l'on peut démontrer à partir de l'équation de Schrödinger. On appelle $|\psi\rangle$ l'état quantique d'un spin. En présence d'un champ magnétique, sa dynamique est gouvernée par l'équation de Schrödinger suivante:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle, \quad H = -\gamma\vec{S}\cdot\vec{B}. \tag{1.4}$$

Les composantes de l'opérateur de spin $\vec{S}$ sont reliées aux matrices de Pauli suivant les formules $S_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k$. Pour le cas idéal d'un seul spin non couplé, les composantes du moment magnétique $\vec{M}$ d'un proton sont données en fonction de la moyenne quantique des composantes de l'opérateur de spin $\vec{S}$ et du facteur gyromagnétique:

$$M_X = \gamma\langle\psi|S_X|\psi\rangle, \quad M_Y = \gamma\langle\psi|S_Y|\psi\rangle, \quad M_Z = \gamma\langle\psi|S_Z|\psi\rangle. \tag{1.5}$$

La dynamique de chaque composante M_k se calcule alors en dérivant la valeur moyenne $\langle\psi|S_k|\psi\rangle$, ce qui donne:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}M_k &= \gamma\left(\frac{d}{dt}\langle\psi|\right)S_k|\psi\rangle + \gamma\langle\psi|S_k\left(\frac{d}{dt}|\psi\rangle\right)\\ &= \tfrac{i\gamma}{\hbar}\langle\psi|HS_k|\psi\rangle - \tfrac{i\gamma}{\hbar}\langle\psi|S_iH|\psi\rangle\\ &= \tfrac{i\gamma}{\hbar}\langle\psi|[H,S_k]|\psi\rangle,\end{aligned} \tag{1.6}$$

avec $k = \{X, Y, Z\}$. En développant l'opérateur Hamiltonien de l'équation (1.4), et en se servant des relations de commutation (1.1), on obtient les équations de Bloch:

$$\dot{\vec{M}} = \gamma\vec{M}\wedge\vec{B}, \tag{1.7}$$

avec $\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}_1$. La dynamique (1.7) conserve la norme du vecteur de Boch $\vec{M}$. Celui-ci reste à la surface d'une sphère appelée *sphère de Bloch*. Les champs magnétiques et le vecteur de Bloch $\vec{M}$ sont représentés sur la figure 1.1.

Pour bien comprendre la dynamique de cette équation, il est plus simple de se placer dans un repère tournant à la fréquence de Larmor ω_0 autour de la direction $\vec{Z}$. Cette démarche est motivée par le fait que dans ce référentiel, en l'absence du champ $\vec{B}_1$, le vecteur $\vec{M}$ est statique puisqu'il tourne à la même fréquence ω_0 autour de l'axe $\vec{Z}$ du laboratoire. Le champ de contrôle $\vec{B}_1$ est choisi de façon à ce qu'il n'oscille pas dans le repère tournant. Cela revient à fixer la fréquence du champ $\omega = \omega_0$ dans l'équation (1.3). L'influence des champs de contrôle sur la dynamique de $\vec{M}$ sera alors décrite de manière plus intuitive. Le changement de repère est représenté sur la figure 1.2.

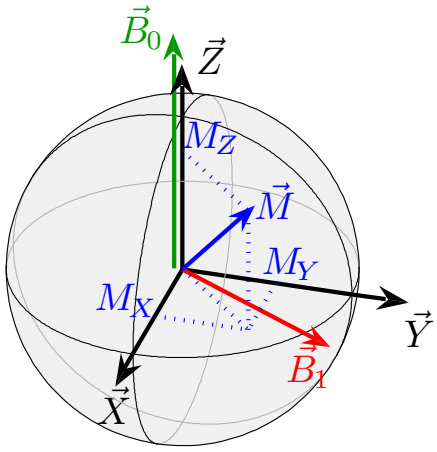

FIGURE 1.1 – Vecteur de Bloch $\vec{M}$ (en bleu), champ magnétique $\vec{B}_0$ (en vert) et champ de contrôle $\vec{B}_1$ (en rouge) dans le repère du laboratoire.

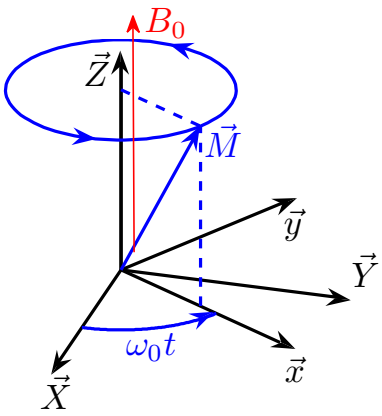

FIGURE 1.2 – Mouvement propre de $\vec{M}$ dans le repère du laboratoire $(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$, sous l'effet d'un champ magnétique $B_0\vec{Z}$. Le repère $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ tourne à la fréquence ω_0, qui correspond à la fréquence de précession de $\vec{M}$.

Pour étudier la dynamique dans le repère tournant, on applique au système une rotation $R_Z(t)$ qui correspond à une rotation d'angle ωt autour de l'axe $\vec{Z}$. Dans l'idéal, la fréquence ω est égale à la fréquence de Larmor ω_0 du spin. En pratique, pour une expérience standard de RMN en phase liquide, on travaille sur un échantillon de taille macroscopique contenant un très grand nombre de spins dont les fréquences de Larmor sont différentes. Cette différence est due à des disparités dans l'environnement de chaque spin et aux variations locale du champ $\vec{B}_0$. Pour être rigoureux dans les calculs, on note ω la fréquence de rotation du repère tournant et ω_0 la fréquence de Larmor du spin.

La matrice de rotation qui permet de passer du repère fixe au repère tournant s'exprime

sous la forme:

$$R_Z(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & -\sin(\omega t) & 0 \\ \sin(\omega t) & \cos(\omega t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1.8}$$

Les coordonnées du vecteur de Bloch exprimées dans la base tournante $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ sont données par:

$$\begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} = R_Z \begin{pmatrix} M_X \\ M_Y \\ M_Z \end{pmatrix}. \tag{1.9}$$

En dérivant chacune des coordonnées M_x, M_y et M_z, on peut montrer que dans le repère tournant, le vecteur de Bloch a une dynamique de la forme:

$$\begin{pmatrix} \dot{M}_x \\ \dot{M}_y \\ \dot{M}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta & -\gamma b \\ -\Delta & 0 & \gamma a \\ \gamma b & -\gamma a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix}, \tag{1.10}$$

où a et b sont les composantes du champs de contrôle exprimées dans la base tournante $R_Z\vec{B}_1$. Ils sont donnés par:

$$\begin{cases} a = B_{1X}(t)\cos^2(\omega t) - B_{1Y}(t)\sin(\omega t)\cos(\omega t + \varphi), \\ b = B_{1X}(t)\cos(\omega t)\sin(\omega t) + B_{1Y}(t)\cos(\omega t)\cos(\omega t + \varphi), \end{cases} \tag{1.11}$$

et $\Delta = \omega_0 - \omega$. On dit que ω est quasi-résonnant si $\frac{\omega - \omega_0}{\omega} \ll 1$. Si cette condition est vérifiée, la contribution du paramètre ω sera en moyenne nulle sur un intervalle de temps grand devant $2\pi/\omega$. Les expressions de a et b s'écrivent dans ce cas:

$$a = \frac{B_{1X}}{2} + \frac{B_{1Y}}{2}\sin(\varphi), \quad b = \frac{B_{1Y}}{2}\cos(\varphi). \tag{1.12}$$

Cette approximation est connue sous le nom de "rotating wave approximation" (RWA). Dans la suite du manuscrit, on fixe la phase $\varphi = 0$, et on introduit les notations:

$$\omega_x = \frac{\gamma B_{1X}}{2}, \quad \omega_y = \frac{\gamma B_{1Y}}{2}. \tag{1.13}$$

Les équations de Bloch se réécrivent finalement:

$$\dot{\vec{M}} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta & -\omega_y \\ -\Delta & 0 & \omega_x \\ \omega_y & -\omega_x & 0 \end{pmatrix} \vec{M}. \tag{1.14}$$

Les champs de contrôle ω_x, ω_z et l'offset Δ impliquent respectivement des rotations autour des axes $\vec{x}$, $\vec{y}$ et $\vec{z}$ du repère tournant. L'avantage de cette équation par rapport à l'équation (1.7) tient au fait que comme la fréquence ω est égale ou proche de la fréquence de résonance ω_0 du spin, le paramètre $\Delta = \omega_0 - \omega$ est petit voire nul. La dynamique de $\vec{M}$ est alors plus intuitive. La figure 1.3 montre l'effet d'un champ ω_y dirigé selon l'axe $\vec{y}$ du repère tournant.

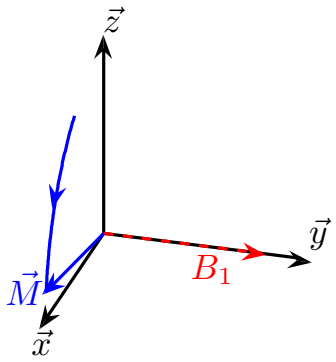

FIGURE 1.3 – Dynamique de $\vec{M}$ dans le repère tournant à la résonance ($\Delta = 0$), sous l'effet d'une impulsion polarisée dans la direction $\vec{y}$.

On peut introduire dans les équations de Bloch des paramètres phénoménologiques appelés *temps de relaxation caractéristiques* qui décrivent l'interaction du spin avec son environnement. Ces paramètres impliquent un retour du vecteur de Bloch à sa position d'équilibre thermodynamique située au pôle nord de la sphère. Cette relaxation peut se décomposer sous forme d'une relaxation *longitudinale*, de temps caractéristique T_1, et d'une relaxation *transversale* de temps caractéristique T_2. La relaxation longitudinale est aussi connue sous le nom de "spin-lattice relaxation". Cette terminologie fait référence au fait qu'après avoir gagné de l'énergie suite à l'application d'une impulsion radiofréquence, les spins redistribuent cette énergie dans leur environnement, rétablissant ainsi l'état d'équilibre thermique du système. Le temps de relaxation transversal T_2 est dû au fait que la fréquence de précession de chaque spin est légèrement différente. Ce phénomène est lié aux différences environnementale des spins et à des différences locales du champ $\vec{B}_0$. Si les fréquences de précession de chaque spin ne sont pas les mêmes, alors ils vont tous se disperser petit à petit, ce qui a pour effet de diminuer l'intensité du moment magnétique résultant. Ce phénomène est appelé *relaxation spin-spin* ou *décohérence quantique*. En tenant compte de cette relaxation, les équations de Bloch s'écrivent sous la forme:

$$\dot{\vec{M}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{T_2} & \Delta & -\omega_y \\ -\Delta & -\frac{1}{T_2} & \omega_x \\ \omega_y & -\omega_x & -\frac{1}{T_1} \end{pmatrix} \vec{M} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{M_0}{T_1} \end{pmatrix}, \tag{1.15}$$

où M_0 est la norme du vecteur de Bloch lorsque celui-ci se trouve dans sa position d'équilibre. Cette équation n'est plus conservatrice car la norme de $\vec{M}$ n'est pas constante. Le vecteur de Bloch est défini dans une boule dite *boule de Bloch* de rayon M_0. On peut montrer que cette équation admet un point d'équilibre en ${}^t(0, 0, M_0)$. On retrouve l'équation conservatrice lorsque la durée totale du processus que l'on étudie est très courte devant les temps de relaxation, ce qui équivaut à dire que les temps T_1 et T_2 sont très grands et que les termes correspondants dans l'équation de Bloch sont négligeables.

Les rôles des paramètres T_1 et T_2 peuvent être décrits de manière intuitive. Pour cela, passons en coordonnées cylindriques en faisant le changement de coordonnées $M_x = r \sin\theta$,

$M_y = r\cos\theta$ et $M_z = M_z$, puis intégrons le système sans champ de contrôle. La variable r correspond au rayon du cylindre et θ est l'angle entre la projection de $\vec{M}$ dans le plan $(\vec{x}, \vec{y})$ et l'axe $\vec{y}$. Le système de coordonnées est illustré sur la figure 1.4.

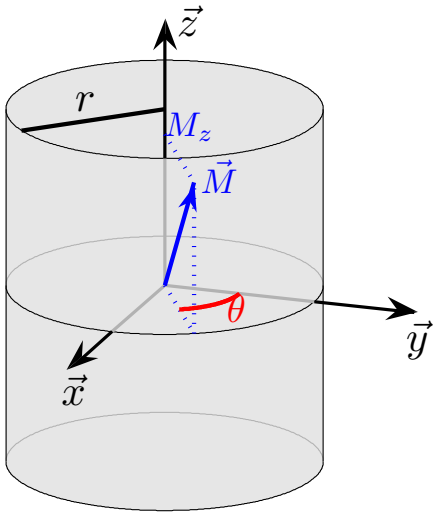

FIGURE 1.4 – Coordonnées cylindriques utilisées pour analyser la dynamique du vecteur de Bloch sous l'effet de la relaxation. Le vecteur de Bloch $\vec{M}$ appartient au cylindre dont le rayon r diminue au cours du temps.

On peut montrer que la dynamique de r, θ et M_z vérifie:

$$\dot{r} = -\frac{r}{T_2}, \quad \dot{\theta} = \Delta, \quad \dot{M}_z = \frac{M_0 - M_z}{T_1}. \tag{1.16}$$

En partant d'un point quelconque de la boule de Bloch $(r_0, \theta_0, M_{z,0})$, l'intégration du système est triviale et donne:

$$r(t) = r_0 e^{-\frac{t}{T_2}}, \quad \theta(t) = \Delta t + \theta_0, \quad M_z(t) = M_0 - (M_0 - M_{z,0})e^{-\frac{t}{T_1}}. \tag{1.17}$$

On remarque que le temps de relaxation transversal T_2 a pour effet de diminuer le rayon du cylindre sur lequel se trouve $\vec{M}$. Plus le temps T_2 est faible, plus le rayon du cylindre diminue rapidement. Le paramètre T_1 quant à lui n'affecte que la composante M_z du vecteur de Bloch. On voit que lorsque t augmente, M_z augmente jusqu'à atteindre la valeur M_0, ce qui correspond à la position d'équilibre du vecteur de Bloch.

Pour que la dynamique du système soit physiquement cohérente, on doit toujours avoir $|\vec{M}(t)| \leq M_0$. Les conditions nécessaires pour vérifier cette propriété sont équivalentes à celles démontrées par Lindblad [47] et Gorini [48]. Dans notre cas, la contrainte est la suivante [49]:

$$2T_1 \geq T_2. \tag{1.18}$$

En RMN, la relaxation est un phénomène capital, car l'information sur le système est acquise durant cette phase de l'évolution.

Mesure d'un signal RMN

Une expérience de RMN est qualitativement simple à comprendre [20]. Initialement, l'aimantation est à l'équilibre au pôle nord de la boule de Bloch, autrement dit $\vec{M}(0) = (0, 0, M_0)$. Dans un premier temps, on applique un pulse résonant au système, de sorte que le vecteur $\vec{M}$ se retrouve sur l'équateur de la boule de Bloch. Ce processus doit être suffisamment court par rapport aux temps caractéristiques de relaxation. En général, le pulse est destiné à une certaine espèce chimique, c'est-à-dire que la fréquence de résonance est choisie pour exciter uniquement certains noyaux.

Durant la deuxième phase, on laisse le système évoluer librement sous l'influence de $\vec{B}_0$ ($\omega_x = \omega_y = 0$) et des paramètres de relaxation. Elle est appelée Free Induction Decay (FID). En retournant à leurs positions d'équilibre, les spins vont induire un moment magnétique dans une bobine attachée au repère fixe du laboratoire, qui va elle même induire un signal électrique que l'on peut mesurer. La bobine étant attachée au repère fixe, elle détecte un signal oscillant. De plus, la relaxation transversale T_2 implique que l'intensité du signal décroit en fonction du temps. Le signal obtenu est alors un signal oscillant avec un amortissement exponentiel.

On applique ensuite une transformée de Fourier sur le signal obtenu, ce qui va permettre de connaître la composition de l'échantillon et la structure des molécules. Le spectre obtenu est constitué de l'ensemble des fréquences δ de chaque spin centrés autour de la valeur de la fréquence de Larmor. La figure 1.5 illustre la trajectoire du vecteur $\vec{M}$ dans la boule de Bloch, le signal obtenu et sa transformée de Fourier pour le cas d'un spin non couplé.

1.2.2 Effet des inhomogénéités

En pratique, les champs $\vec{B}_0$ et $\vec{B}_1$ ne sont pas parfaitement homogènes. En d'autres termes, l'intensité de ces champs varie en fonction de la position spatiale du spin considéré [20]. Dans un premier temps, on ne considère que les inhomogénéités du champ magnétique $\vec{B}_0$ que l'on écrit sous la forme $\vec{B}_0 = B_0(X, Y, Z)\vec{z}$. En construisant les équations de Bloch, nous avons vu que le champ $\vec{B}_0$ intervient dans le terme d'offset Δ, qui n'induit que des rotations autour de l'axe $\vec{z}$ de la sphère de Bloch. La dynamique du vecteur de Bloch est donc gouvernée par des équations de Bloch qui dépendent de la position spatiale du spin. Les paramètres de relaxation T_1 et T_2 n'étant pas affectés par ces inhomogénéités, on peut considérer les équations de Bloch sans relaxation pour simplifier le modèle. En présence des inhomogénéités, les équations de Bloch sont de la forme:

$$\dot{\vec{M}}_{X,Y,Z} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(X,Y,Z) & -\omega_y \\ -\Delta(X,Y,Z) & 0 & \omega_x \\ \omega_y & -\omega_x & 0 \end{pmatrix} \vec{M}_{X,Y,Z}. \tag{1.19}$$

Si l'on ne tient pas compte de ces inhomogénéités, la dynamique de l'aimantation risque d'être très différente de celle qui est attendue et il en va de même pour les résultats de

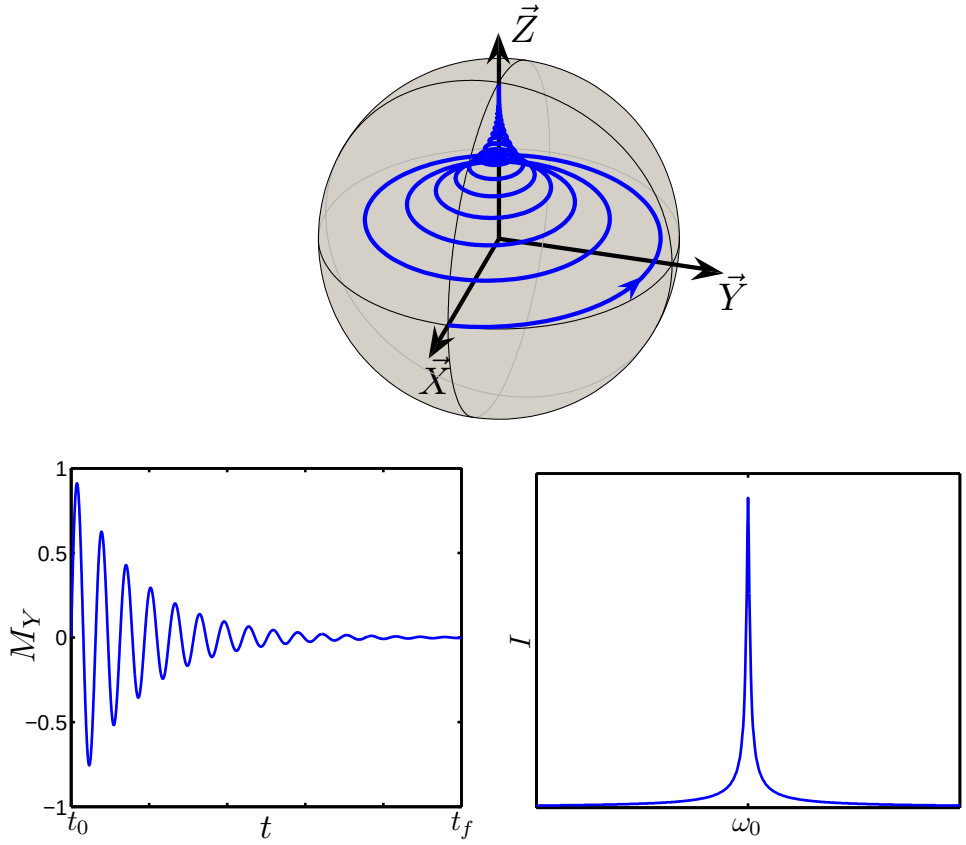

FIGURE 1.5 – *En haut:* Trajectoire du vecteur de Bloch sous l'effet de la relaxation. Le vecteur de Bloch est le long de l'axe $\vec{X}$ du laboratoire à l'instant $t = t_0$.*En bas:* Signal mesuré (à gauche) et sa transformé de Fourier (à droite).

la mesure. Lors de l'excitation de l'ensemble des spins, le signal est d'autant plus intense que les spins de l'échantillon sont tous alignés sur un point de l'équateur. Cependant, si la dépendance spatiale de $\vec{B}_0$ est forte, les spins se dispersent et n'atteignent pas nécessairement le plan équatorial de la sphère de Bloch, ce qui diminue d'autant le signal émis dans la bobine. L'effet est illustré sur la figure 1.6.

Le champ de contrôle $\vec{B}_1$ est également inhomogène. Son intensité dépend elle aussi de la position spatiale du spin. Plus formellement, on peut modéliser ces inhomogénéités en introduisant un facteur d'échelle $\alpha(X, Y, Z)$ de telle sorte que $\vec{B}_1(X, Y, Z) = (1 + \alpha(X, Y, Z))(B_{1x}\vec{x} + B_{1y}\vec{y})$. Cela se répercute sur les contrôles du repère tournant ω_x et ω_y. En prenant en compte les inhomogénéités de $\vec{B}_0$ et $\vec{B}_1$, les équations de Bloch sont de la forme:

$$\dot{\vec{M}}_{X,Y,Z} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(X,Y) & -(1+\alpha(X,Y,Z))\omega_y \\ -\Delta(X,Y) & 0 & (1+\alpha(X,Y,Z))\omega_x \\ (1+\alpha(X,Y,Z)\omega_y & -(1+\alpha(X,Y,Z))\omega_x & 0 \end{pmatrix} \vec{M}_{X,Y,Z}. \quad (1.20)$$

Pour améliorer le signal obtenu, l'objectif est alors de déterminer un pulse $(\omega_x(t), \omega_y(t))$

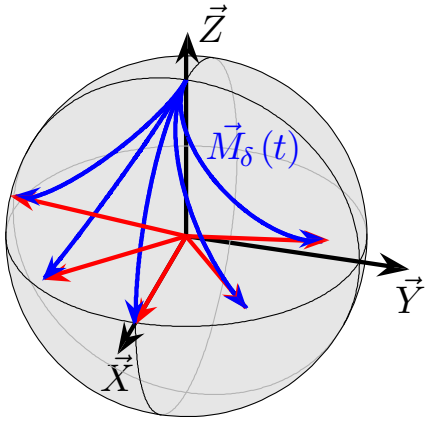

FIGURE 1.6 – Effet des inhomogénéités $\vec{B}_0$ sur la dynamique des spins sous l'effet d'un pulse d'excitation. Les flèches rouges représentes les spins à l'instant t_f, et les trajectoires bleues représentent la dynamique de chaque spin au cours du temps. Plus le spin est loin de la résonance et plus il est éloigné de l'axe $\vec{x}$ à l'instant t_f.

qui soit robuste par rapport à ces inhomogénéités, c'est-à-dire des contrôles qui ont des propriétés telles qu'ils permettent de réaliser un certain transfert sans que celui-ci ne soit affecté par les inhomogénéités. Ce problème a fait l'objet de nombreuses recherches [20, 50, 51, 52, 53]. De nombreuses méthodes ont étés mises au point, basées notamment sur le théorème adiabatique [43] ou la méthode des pulses composites [54]. Nous verrons qu'il est très difficile de manipuler ce genre d'équations en contrôle optimal. Un moyen efficace pour résoudre ce problème est de considérer non pas des fonctions α et Δ continues dans l'espace, mais un ensemble discret de spins, où chaque spin est associé à un couple de valeurs (Δ, α). Si l'ensemble est composé de $N_\Delta \times N_\alpha$ spins, alors le contrôle optimal permet de trouver des champs qui permettent de manipuler tous les spins simultanément. En d'autres termes, il consiste à manipuler, avec un seul pulse $(\omega_x(t), \omega_y(t))$, les $N_\Delta \times N_\alpha$ équations de Bloch suivantes:

$$\dot{\vec{M}}_{\alpha,\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta & -(1+\alpha)\omega_y \\ -\Delta & 0 & (1+\alpha)\omega_x \\ (1+\alpha)\omega_y & -(1+\alpha)\omega_x & 0 \end{pmatrix} \vec{M}_{\alpha,\Delta}, \tag{1.21}$$

avec $\alpha \in \{\alpha_1 \cdots \alpha_{N_\alpha}\}$ et $\Delta \in \{\Delta_1, \cdots, \Delta_{N_\Delta}\}$. Lorsque l'on traite ce type de problème avec des méthode numériques, il est nécessaire de discrétiser le temps en N pas. Le nombre N de pas de temps doit alors être suffisamment grand pour que la dynamique soit pertinente vis-à-vis d'un système réel où le temps est continu.

1.2.3 Contrôle optimal en Résonance Magnétique Nucléaire

Dans cette section, nous donnons trois exemples d'application du contrôle optimal en résonance magnétique nucléaire, afin d'introduire de façon très succincte le rôle de cette méthode. De très nombreux résultats obtenus grâce à la théorie du contrôle optimal sont présentés dans [38].

Dans un problème de RMN, la théorie du contrôle optimal s'applique pour le calcul des champs de contrôle ω_x et ω_y des équations de Bloch. Une particularité du contrôle optimal est que dans certains cas, il permet d'explorer les limites physiques du problème, comme le temps minimum ou l'énergie minimum que requiert un certain transfert. Par exemple, il a permis de déterminer le temps minimum nécessaire à un seul spin pour être saturé [49, 55, 56]. Le problème de la saturation consiste à transférer le vecteur de Bloch depuis le pôle nord de la boule de Bloch, i.e. $\vec{M}(0) = (0, 0, M_0)$ vers son centre, i.e. $\vec{M}(t_f) = (0, 0, 0)$ à la fin du processus. Pour un tel transfert, il est nécessaire de se servir intelligemment des paramètres de relaxation pour arriver sur la cible. La solution de ce système n'est pas triviale et met en valeur une certaine structure des équations de Bloch appelée le *plan magique*. Celui-ci est un plan en dessous du plan équatorial, dont la position dépend des paramètres de relaxation T_1 et T_2, que le vecteur $\vec{M}$ doit suivre pendant un certain temps avant d'arriver au centre de la boule de Bloch. Cela a permis de déterminer le temps théorique minimum pour réaliser un tel transfert.

Un autre problème difficile que le contrôle optimal permet de traiter efficacement est le problème du contraste en Imagerie Médicale [57, 58]. Le problème du contraste vise à maximiser le signal d'une certaine espèce chimique, tout en minimisant celui d'une autre. Une expérience à été réalisée sur un échantillon contenant du sang oxygéné et du sang désoxygéné. Ceux-ci ont le même paramètre de relaxation longitudinal T_1, mais des paramètres T_2 différents, et le but était de trouver un champ de contrôle qui permet de saturer le signal émis par le sang désoxygéné, et de maximiser celui du sang oxygéné. Le résultat est présenté dans [58].

Le problème de la robustesse expliqué plus haut a aussi été exploré pour réaliser des transformations unitaires appliquées à un système à deux niveaux sans relaxation [59, 60]. Ces transformations réalisent un transfert qui ne dépend pas des conditions initiales. Le travail porte sur des rotations d'angles π et $\pi/2$ autour d'un axe de la sphère de Bloch. En d'autres termes, les pulses calculés permettent de faire pivoter le vecteur aimantation d'un angle π ou $\pi/2$ quelque soit sa position à l'instant initial, et de surcroît de façon robuste par rapport aux inhomogénéités du champ $\vec{B}_0$.

1.3 Introduction à l'information quantique

Cette section a pour but d'introduire quelques notions fondamentales en information quantique. Le sujet étant très vaste [17, 61], on se contentera des concepts nécessaires qui seront abordés dans cette thèse, à savoir le *qubit* et les *portes quantiques*. L'information quantique est apparue au début des années 1990, quand Artur Ekert développait une approche de cryptographie basée sur l'intrication quantique [62]. Peter Shor découvrait trois ans plus tard un algorithme quantique, qui, pour un nombre entier N donné, trouve tous les nombre premiers qui divisent N [63]. Cet algorithme nécessite un ordinateur quantique et fonctionne beaucoup plus rapidement qu'un algorithme classique. Aujourd'hui, plusieurs propositions ont été faites pour mettre au point des ordinateurs quantiques [64]. Cependant, la réalisation de telles technologies ne semble pas possible dans un futur proche, principalement parce qu'elles requièrent que le système interagisse très peu avec l'environnement. De plus, du point de vue du contrôle, l'erreur relative maximum permise pour la manipulation des qubits doit être inférieure à 10^{-4} [65], ce qui est encore loin d'être le cas en général.

1.3.1 Information classique

La théorie de l'information classique est fondée sur le *binairy digit*, ou *bit*, qui est une unité d'information pouvant prendre la valeur 0 ou 1. Au sein d'un ordinateur, toute information, que ce soit une lettre, une couleur, un nombre, est codée par une combinaison de N bits qui peuvent être dans un état 0 ou 1. L'information est traitée par des opérations logiques appelées *portes*, qui sont des transformations qui font passer un ensemble de bits d'un état à un autre. Par exemple, le NON logique (ou porte NOT) est une opération qui s'applique à un seul bit. Cette transformation envoie le bit dans l'état 1 s'il est initialement dans l'état 0 et vice versa. Ce type d'opération est plus complexe si l'on considère plusieurs bits. Par exemple, la porte CNOT s'applique à un ensemble de deux bits, que l'on appelle a et b. Elle est définie de la manière suivante: si le bit a est dans l'état 0, l'état du système reste inchangé. Si a est dans l'état 1, le bit b change d'état. Le tableau suivant décrit cette transformation.

Avant		Après	
a	b	a	b
0	0	0	0
0	1	0	1
1	0	1	1
1	1	1	0

1.3.2 Portes quantiques à un qubit

En information quantique, l'unité d'information est appelée le *bit quantique*, ou *qubit*. La différence fondamentale avec le bit classique est que le qubit peut prendre la valeur 0

ou 1, mais aussi être dans un état qui est une combinaison linéaire de 0 et 1 [17, 61]. Plus formellement, l'état d'un qubit est décrit par un vecteur unitaire dans une base donnée de l'espace de Hilbert de la forme:

$$|\lambda\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle\,, \tag{1.22}$$

avec $\langle\lambda|\lambda\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Dans ce cas, les opérations logiques sont des transformations unitaires appliquées au vecteur $|\lambda\rangle$. Citons par exemple la porte NOT qui est une transformation de la forme [17, 61]:

$$|\lambda_0\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle \xrightarrow{\text{NOT}} |\lambda_f\rangle = \beta\,|0\rangle - \alpha\,|1\rangle\,. \tag{1.23}$$

Toutes les opérations logiques peuvent être représentées sous forme matricielle. Une porte est une transformation de la forme $|\lambda_f\rangle = U_T\,|\lambda_0\rangle$, avec U_T une matrice carrée de même dimension que le vecteur λ. Pour la porte NOT, la matrice U_T vérifie:

$$U_T = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{1.24}$$

Le signe $-$ assure que U_T est de déterminant 1. On trouve la plupart du temps dans la littérature des portes de déterminant -1. Notre choix est dû au fait que les transformations sont dans le groupe unitaire $SU(2)$, car on considère que la dynamique est gouvernée par un opérateur Hamiltonien qui appartient à l'algèbre de Lie $su(2)$. Le vecteur $|\lambda\rangle$ étant unitaire, il peut être paramétré par des angles suivant la relation:

$$|\lambda\rangle = e^{-i\frac{i\psi}{2}}\left(e^{-i\frac{\phi}{2}}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\frac{\phi}{2}}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle\right), \tag{1.25}$$

où ψ est une phase globale que nous aborderons plus loin. Le qubit peut être représenté par un vecteur de Bloch [17, 61]. Les composantes du vecteur de Bloch associé à (1.25) s'obtiennent à l'aide des matrices de Pauli. On note la base $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ dans laquelle le vecteur de Bloch se décompose sous la forme $\vec{M} = {}^t(M_x, M_y, M_z)$. Chaque composante M_i est donnée par la relation $M_i = \langle\lambda|\sigma_i|\lambda\rangle$, ce qui donne $\vec{M} = {}^t(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$. Si $\theta = 0$, le système est dans l'état $|\lambda\rangle = |0\rangle$. Si $\theta = \pi$, il est dans l'état $|1\rangle$. Tous les autres points de la sphère de Bloch correspondent à des états superposés. Le vecteur et la sphère de Bloch sont représentés sur la figure 1.7.

Dans les coordonnées de Bloch, les opérations logiques reviennent à effectuer des rotations autour d'un ou plusieurs axes de la sphère de Bloch qui ne dépendent pas de l'état initial $\vec{M}(0)$. Une porte quantique à un seul qubit peut alors être représentée comme la rotation d'un repère $(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$ dans le repère attaché à la sphère de Bloch. Plus exactement, une matrice de rotation R du groupe $SO(3)$ est associée au signe près à un propagateur U du groupe $SU(2)$ [66]. Une matrice de rotation quelconque du groupe $SO(3)$ peut être décomposée en fonction des trois matrices R_x, R_y et R_z qui correspondent respectivement à des rotations d'un angle α autour des axes $\vec{x}$, $\vec{y}$ et $\vec{z}$ de la sphère de Bloch. Ces matrices

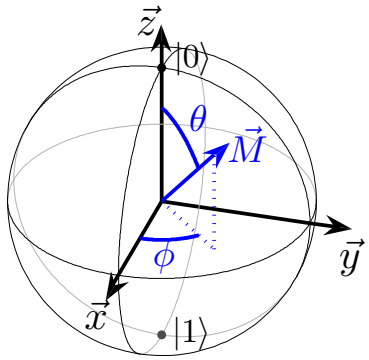

FIGURE 1.7 – Vecteur de Bloch en fonction des angles θ et ϕ. Un bit classique ne peut être que sur le pôle nord ou le pôle sud de la sphère.

de base sont données par:

$$R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}, \quad R_y = \begin{pmatrix} \cos\alpha & 0 & \sin\alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\alpha & 0 & \cos\alpha \end{pmatrix}, \quad R_z = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

Elles correspondent respectivement à des matrices d'évolution U_x, U_y et U_z du groupe $SU(2)$ de la forme:

$$U_x = \pm \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) & -i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ -i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix}, \; U_y = \pm \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix}, \; U_z = \pm \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}. \quad (1.27)$$

Reprenons l'exemple de la porte NOT. On rappelle qu'indépendamment de l'état initial du système, la porte NOT réalise la transformation $|\lambda_f\rangle = U_T\,|\lambda_0\rangle$, où U_T est la matrice donnée dans l'équation (1.24). La matrice U_T s'exprime donc en fonction de la matrice U_y ci-dessus par $U_T = U_y(\pi)$. Elle correspond donc à une rotation d'angle π autour de l'axe $\vec{y}$ de la sphère de Bloch, soit une transformation de la forme $\vec{M}(t_f) = R_y(\pi)\vec{M}_0$ avec:

$$R_y(\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.28)$$

Pour représenter cette transformation, on introduit le repère orthonormé $(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$. Comme la porte NOT est une opération unitaire qui ne dépend pas des conditions initiales, elle réalise une rotation de π autour de l'axe $\vec{y}$ pour les trois axes du repère $(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$. Si c'est le cas, cela signifie que n'importe quel vecteur $\vec{M}$ effectue une rotation de π autour de l'axe $\vec{y}$ de la sphère de Bloch. La porte peut donc être représentée comme une rotation du repère $(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$ dans le repère attaché à la boule de Bloch. Ceci est représenté sur la figure 1.8.

Sur cette figure, à l'instant $t = 0$, le repère $(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$ est volontairement confondu avec le repère attaché à la sphère de Bloch pour simplifier la représentation. Quelque soit

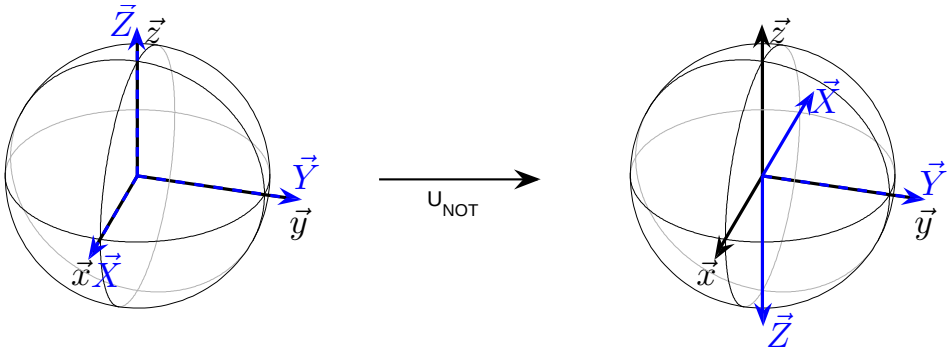

FIGURE 1.8 – Représentation d'une porte NOT sur la sphère de Bloch.

la position relative des repères à l'instant $t = 0$, la porte NOT est réalisée à condition qu'à l'instant $t = t_f$, le repère $(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$ ait effectué une rotation de π autour de l'axe $\vec{y}$ de la sphère de Bloch. Ce repère peut être choisi différemment. En particulier, on peut le choisir de manière à ce que l'un des axes, par exemple l'axe $\vec{Z}$, soit confondu avec le vecteur de Bloch $\vec{M}$. On peut alors repérer $\vec{Z}$ par les deux angles θ et ϕ de la figure 1.7. Pour repérer les deux autres axes $\vec{X}$ et $\vec{Y}$, nous pouvons nous servir d'un troisième angle, de sorte que le repère $(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$ soit repéré par trois angles, qui ne sont rien d'autre que les angles d'Euler. Ce troisième angle peut être choisi comme égal à ψ, la phase globale de l'état $|\lambda\rangle$ (Eq. (1.25)). Cela donne une manière de représenter complètement l'état du système sur la sphère de Bloch. Les angles d'Euler sont illustrés sur la figure 1.9. En

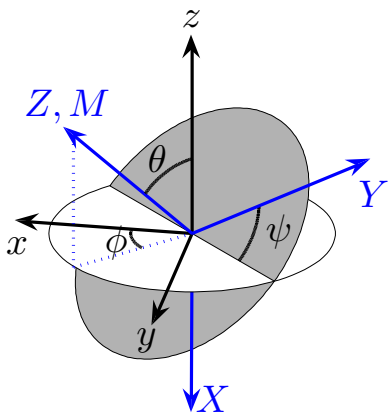

FIGURE 1.9 – Représentation des trois angles θ, ϕ et ψ de l'état $|\lambda(t)\rangle$ (Eq. (1.25)). $\vec{M}$ est le vecteur de Bloch associé à cet état, ψ est la phase globale du système.

définissant le repère $(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$ de cette façon, une porte quantique peut être interprétée comme un transfert d'état à état (c'est à dire de $\vec{M}_0$ à $\vec{M}_f$) qui tient compte de la phase globale du système (décrite par l'angle ψ de la figure 1.9). En effet, le transfert d'état à état est décrit seulement par les deux angles θ et ϕ. La connaissance supplémentaire de l'angle ψ permet de déterminer la dynamique du repère complet.

La porte NOT fait partie d'une famille de portes plus générale, appelées les *portes rotations*, qui consistent en des rotations d'un angle α autour de l'axe $\vec{y}$ de la sphère de

Bloch. Une porte rotation s'écrit sous la forme:

$$U_{\text{rot}}(\alpha) = U_y(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & -\sin(\alpha/2) \\ \sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix}. \tag{1.29}$$

Dans cette thèse, nous allons étudier à plusieurs reprises la porte NOT, mais aussi une autre famille de portes, dites *portes phase*, qui consistent en une rotation autour de l'axe $\vec{z}$ de la sphère de Bloch. Une telle porte est de la forme:

$$U_{\text{phase}}(\alpha) = U_z(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}. \tag{1.30}$$

Une autre opération connue est la *porte Hadamard*. Celle-ci peut être décomposée par une porte $U_{\text{phase}}(\pi)$ suivie d'une porte $U_{\text{rot}}(\pi/2)$. La porte Hadamard vérifie:

$$U_{\text{Hadamard}} = \frac{-i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1.31}$$

Le facteur $-i$ assure que la transformation appartienne au groupe $SU(2)$. On peut vérifier que l'on a bien $U_{\text{Hadamard}} = U_{\text{rot}}(\pi/2) \cdot U_{\text{phase}}(\pi)$. La porte Hadamard est représentée sur la sphère de Bloch sur la figure 1.10.

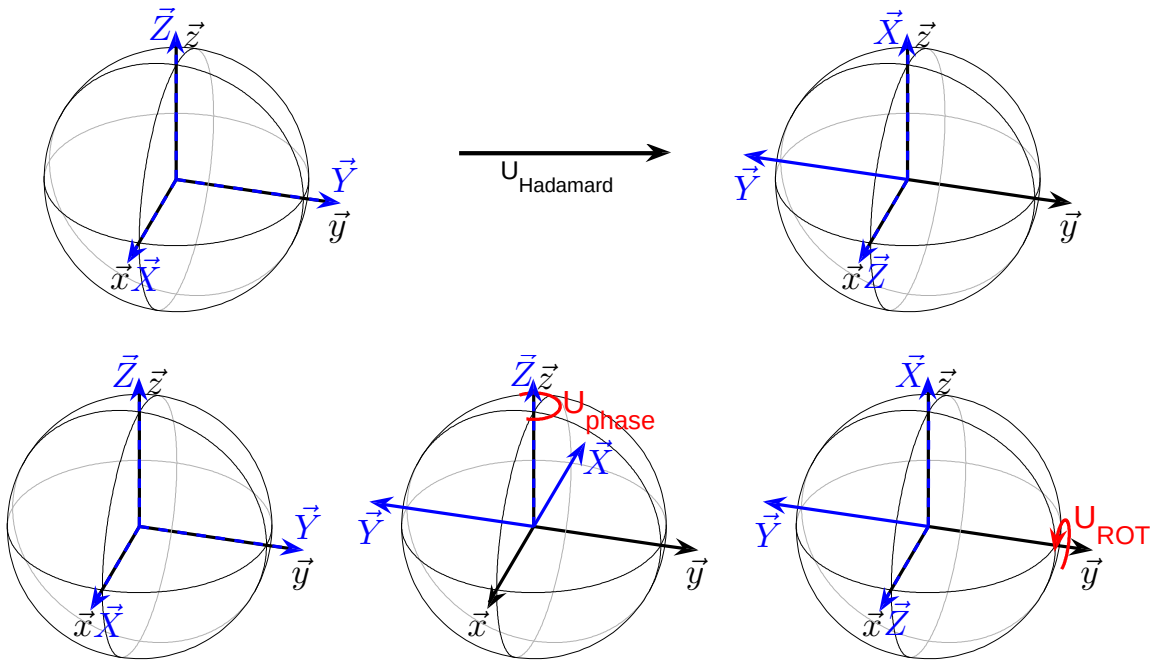

FIGURE 1.10 – *En haut:* Représentation d'une porte Hadamard sur la sphère de Bloch. *En bas:* Décomposition de la porte Hadamard en une porte phase suivie d'une porte rotation.

1.3.3 Portes à deux qubits

Les portes à deux qubits [17, 61] s'appliquent à un ensemble de deux qubits couplés que l'on note a et b. Le système est ainsi composé de quatre états. Ces portes agissent sur la base de l'espace de Hilbert notée $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. Le système est dans l'état $|ij\rangle$ lorsque le qubit a est dans l'état i et b dans l'état j. Nous allons introduire une famille de portes appelées les *portes contrôle-unitaire* et voir deux cas particuliers, la contrôle-NOT et la contrôle-PHASE (respectivement CNOT et CPHASE). Ce type de porte utilise l'un des qubits comme qubit "de contrôle", qui reste inchangé mais dont l'état détermine la transformation appliquée à l'autre qubit. L'état du système est donné par un vecteur normé composé de quatre coordonnées complexes dans la base de l'espace de Hilbert qui vérifie:

$$|\lambda\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle . \tag{1.32}$$

Les coefficients c_{ij} sont des nombres complexes, et la norme au carré du coefficient c_{ij} correspond à la probabilité que le qubit a soit dans l'état i et que le qubit b soit dans l'état j. Si a est le qubit de contrôle, alors les portes CNOT et CPHASE vérifient:

$$U_{\text{CNOT}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad U_{\text{CPHASE}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}. \tag{1.33}$$

Plus généralement, ces portes font partie de la famille des portes contrôle-unitaire, notées CU, qui laissent le qubit a inchangé et effectuent une opération unitaire sur le qubit b. Une telle porte s'écrit sous la forme:

$$U_{CU} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2\times 2} & 0 \\ 0 & U_{2\times 2} \end{pmatrix}, \tag{1.34}$$

où $U_{2\times 2}$ est une transformation unitaire quelconque, qui peut être une porte NOT, une porte PHASE, etc...

1.3.4 Ensemble universel de portes

Un ensemble universel de portes quantiques est composé d'un ensemble de portes à partir desquelles on peut générer n'importe quelle opération quantique, pour un nombre arbitraire de qubits [67]. Un ensemble de portes à un et deux qubits peut suffire à être universel. Une seule porte à deux qubits permet de coupler tous les spins du système. Une représentation schématique d'un calcul quantique est donné sur la figure 1.11.

Par exemple, l'ensemble {PHASE,ROTATION,CPHASE} est un ensemble universel de portes quantiques. A partir de cet ensemble, il est possible de reconstituer, par exemple, la porte CNOT, en combinant deux portes Hadamard, elles mêmes composées d'une porte PHASE(π) et ROTATION($\pi/2$), et d'une porte CPHASE(π) [68].

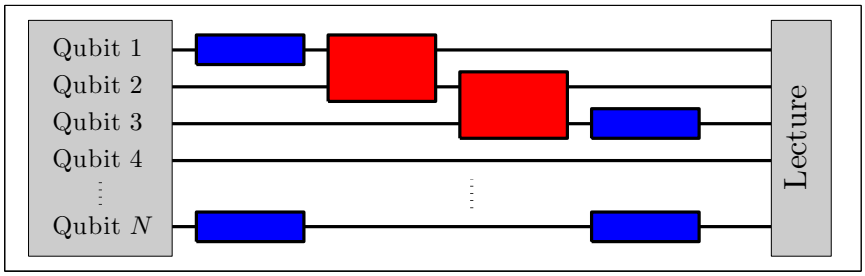

FIGURE 1.11 – Schéma d'un circuit quantique. Les rectangles bleus sont des portes à un qubit, et les rectangles rouges des portes à deux qubit. Le temps s'écoule de gauche à droite. Un ensemble universel de porte permet d'atteindre n'importe quel état final au moment de la lecture.

Chapitre 2

Méthodes mathématiques

2.1 Introduction

Nous présentons dans ce chapitre les méthodes mathématiques utilisées tout au long de la thèse. L'objet de ce manuscrit est de présenter l'aspect physique des processus de contrôle des système quantiques. Nous n'aborderons pas en détail les aspects mathématiques des techniques utilisées. Nous renverrons le lecteur vers des références de base plus approfondies.

Pour aborder un problème de contrôle, nous utiliserons souvent la théorie du contrôle optimal, basée sur le principe du maximum de Pontryagin [4, 5, 6, 7, 8]. Cette théorie mathématique permet de déterminer les trajectoires optimales d'un système contrôlé ainsi que les contrôles associés. Nous verrons qu'il y a typiquement deux approches, une approche géométrique, qui s'applique à des modèles relativement simples, et une approche numérique qui permet de traiter des systèmes plus complexes [24, 25, 69]. Les méthodes géométriques nécessitent des outils de la mécanique Hamiltonienne pour intégrer analytiquement les trajectoires et les variables de contrôle [4]. L'analyse géométrique donne une vision globale du système physique et permet dans certains cas de trouver les contrôles globalement optimaux. Les méthodes numériques consistent en des algorithmes itératifs qui permettent de calculer des solutions à des problèmes de contrôle qui peuvent être de très grande dimension [70, 71]. Elles permettent de déterminer seulement des optima locaux, c'est-à-dire que le résultat dépend de l'initialisation du programme et n'est pas forcément le meilleur parmi toutes les solutions possibles. Les méthodes géométriques ont l'avantage d'apporter une bonne compréhension des processus de contrôle. Elles permettent d'explorer les limites physiques du système contrôlé [49, 72]. Cet aspect fait défaut dans les méthodes numériques. Bien que très performantes, les solutions numériques n'apportent en général pas d'arguments physiques concernant les mécanismes de contrôle. La théorie du contrôle optimal sera présentée sans aucune démonstration, celle-ci étant compliquée et présentée dans de nombreux ouvrages de référence [4, 5, 6, 7].

2.2 Problème de contrôle optimal

Comme nous l'avons dit dans l'introduction, le contrôle optimal est basé sur le Principe du Maximum de Pontryagin (PMP) [4]. Ce principe s'applique à des systèmes contrôlés de dimension finie, c'est-à-dire de telle sorte que l'état du système $\vec{x}(t) = \{x_1(t), ..., x_n(t)\} \in \mathbb{R}^n$ soit relié au contrôle $\vec{u}(t) = \{u_1(t), ..., u_m(t)\} \in \mathbb{R}^m$ via une équation différentielle ordinaire, où $\vec{x}$ et $\vec{u}$ peuvent être de dimensions différentes. Un système de contrôle a donc une dynamique régie par une équation de la forme:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x}, \vec{u}, t). \tag{2.1}$$

Supposons que notre système soit contrôlable [3, 73], c'est-à-dire qu'en partant à un instant t_0 d'un état initial $\vec{x}(t_0) = \vec{x}_0$, il existe des contrôles $\vec{u}$ tels qu'à un certain temps t_f le système atteigne un état cible $\vec{x}(t_f) = \vec{x}_c$. On définit la fonctionnelle de coût J suivante:

$$J = \int_{t_0}^{t_f} f^0(\vec{x}, \vec{u}, t)dt, \tag{2.2}$$

où f^0 et J sont des fonctions à valeurs dans $\mathbb{R}$. f^0 est une fonction que l'on choisit. Elle caractérise la quantité physique J que le PMP va permettre de minimiser. On peut aussi choisir de maximiser J, mais dans ce cas on parle plutôt de fidélité que de coût. Le coût J est généralement la durée pour transférer un système d'un état initial vers un état final ou l'énergie que nécessite ce transfert. Le problème est alors le suivant: parmi toutes les stratégies de contrôle $\vec{u}$ qui réalisent le transfert désiré, on veut déterminer celle qui minimise la fonctionnelle de coût J. Cette formulation est plus générale que celle utilisée en calcul variationnel classique [74]. En effet, dans ce dernier cas, la fonction $f^0(\vec{x}, \vec{u}, t)$ est un Lagrangien qui s'écrit $\mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)$, ce qui revient à poser $\vec{u} = \dot{\vec{x}}$ et $\dim[\vec{u}] = \dim \vec{x}$. La trajectoire $\vec{x}$ minimise J si la dérivée de J par rapport au chemin choisi est nulle. Concrètement, si $\vec{x}$ est la trajectoire optimale et si $\vec{x} + \vec{h}$ est une trajectoire voisine de $\vec{x}$, alors la quantité $J(\vec{x} + \vec{h}) - J(\vec{x})$ doit s'annuler. On peut montrer que ceci est vrai si trajectoire $\vec{x}$ satisfait les équations d'Euler-Lagrange suivantes:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{x}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vec{x}}}\right) = 0. \tag{2.3}$$

Ces équations constituent la condition d'optimalité du premier ordre [75]. En d'autres termes, en calcul variationnel classique, la trajectoire qui minimise la fonctionnelle de coût satisfait nécessairement les équations d'Euler-Lagrange.

Dans le contexte du contrôle optimal, on impose la contrainte $\vec{u} \in U$, où U est un sous-espace de $\mathbb{R}^m$. Cette contrainte se comprend aisément dans le cas où les contrôles sont bornés. Par exemple, si le contrôle u est l'angle avec lequel on tourne le gouvernail d'un bateau, la contrainte est de type $u_{\min} \leq u \leq u_{\max}$ et traduit le fait qu'on ne peut pas tourner le gouvernail au delà d'un certain angle. Le contrôle optimal traite un problème plus général, qui permet de retrouver le problème traité par le calcul variationnel classique

en posant $\vec{u} = \dot{\vec{x}}$. La condition d'optimalité du premier ordre est donné par le *Principe du Maximum de Pontryagin* que nous allons énoncer plus loin. La fonction $f^0(\vec{x}, \vec{u}, t)$ dans la fonctionnelle de coût doit être choisie en fonction de la grandeur que l'on veut minimiser. Par exemple, si l'on choisi $f^0(\vec{x}, \vec{u}, t) = 1$, on voit immédiatement que $J = t_f - t_0$ et que le problème consiste à minimiser la durée du passage de l'état initial $\vec{x}_0$ à l'état cible $\vec{x}_c$. Pour minimiser l'énergie que coûte le transfert, on pose $f^0(\vec{x}, \vec{u}, t) = |\vec{u}|^2$, de sorte que $J = \int_{t_0}^{t_f} f^0 dt$ corresponde à l'énergie utilisée par les contrôles.

On peut distinguer trois grandes formes de problèmes de contrôle optimal.

Problème de type Lagrange. Ce problème est celui que nous avons déjà présenté. Dans ce problème, le système est transféré d'un état initial vers un état cible en minimisant un coût qui dépend du chemin suivi. Il s'applique à des systèmes complètement contrôlables car le système atteint exactement l'état cible. Un exemple est la saturation d'un spin en RMN [49] que nous avons évoqué dans la section 1.2.3 du premier chapitre. Dans ce problème, le système est transféré depuis le pôle nord vers le centre de la boule de Bloch en temps minimal.

Problème de type Mayer. Ce cas s'applique à des systèmes dont la cible n'est pas un état précis ou lorsque le système n'est pas contrôlable et que l'on cherche à se rapprocher au maximum de la cible. Le coût est alors un coût terminal qui ne dépend que de l'état à $t = t_f$ de la forme:

$$J = g(\vec{x}(t_f), t_f). \tag{2.4}$$

Par exemple, on a affaire à ce type de problème lorsque l'on cherche à optimiser la robustesse d'un certain transfert, c'est-à-dire de déterminer des contrôles qui restent efficaces malgré l'influence d'événements imprévus sur la dynamique du système. On cherche alors à se rapprocher au mieux d'un état cible $\vec{x}_c$. La fonction g peut s'exprimer sous la forme $g(\vec{x}(t_f)) = ||\vec{x}_c - \vec{x}(t_f)||^2$. Le coût est nul lorsque l'état cible est parfaitement atteint.

Problème de type Mayer Lagrange. C'est la forme de problème la plus générale. Dans ce cas, on cherche à optimiser à la fois la distance entre l'état final et l'état cible et le coût de la trajectoire, qui peut être entre autre l'énergie ou le temps. On a donc un coût qui est la somme des deux précédents, c'est-à-dire:

$$J = g(\vec{x}(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} f^0(\vec{x}, \vec{u}, t) dt \tag{2.5}$$

Ce type de système est appelé problème de Mayer-Lagrange. On peut pondérer les deux termes de ce coût afin de privilégier la précision du transfert, sa durée ou l'énergie utilisée.

2.3 Principe du maximum de Pontryagin

Le principe de maximum de Pontryagin (PMP) permet de traiter un problème de contrôle en l'écrivant sous forme Hamiltonienne. En effet, il stipule que si le contrôle est optimal, il existe un vecteur adjoint $\vec{p}$ et un scalaire p^0 de sorte que l'on puisse définir un pseudo-Hamiltonien de la forme:

$$H_p = \vec{p} \cdot \vec{f} + p^0 f^0, \tag{2.6}$$

avec p^0 une constante négative ou nulle, du fait que nous ayons ici un principe du maximum. Le terme p^0 vient du fait que la fonction f^0 est considérée comme une coordonnée du système. En d'autre terme, on étend le nombre de coordonnées du système. On passe d'un état $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ à un état $\begin{pmatrix} \vec{x} \\ x^0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1}$, avec x^0 tel que $\dot{x}^0 = f^0(x, u, t)$. On fait de même pour l'état adjoint que l'on définit par $\begin{pmatrix} \vec{p} \\ p^0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1}$.

Si une trajectoire $(\vec{x}(t), \vec{p})$ est extrémale, alors elle satisfait les équations de Hamilton-Jacobi données par:

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H_p}{\partial \vec{p}}, \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H_p}{\partial \vec{x}}. \tag{2.7}$$

Le PMP nous dit que les contrôles optimaux $\vec{u}^*$ maximisent le pseudo-Hamiltonien. Formellement, les contrôles vérifient:

$$\mathcal{H}(\vec{x}^*, \vec{p}^*, \vec{u}^*) = \max_{\vec{u} \in U} H_p(\vec{x}^*, \vec{p}^*, \vec{u}), \tag{2.8}$$

où l'exposant * désigne une solution optimale. Le Hamiltonien $\mathcal{H}(\vec{x}^*, \vec{p}^*)$ est appelé Hamiltonien de Pontryagin. En d'autre termes, les contrôles optimaux doivent satisfaire la condition de maximisation:

$$\vec{u}^* = \arg\max_{\vec{u} \in U} H_p(\vec{x}^*, \vec{p}^*, \vec{u}). \tag{2.9}$$

Si le contrôle $\vec{u}$ appartiennent à un ensemble ouvert de $\mathbb{R}^m$ et si H_p est une fonction dérivable par rapport à $\vec{u}$ alors la condition de maximisation implique:

$$\frac{\partial H_p(\vec{x}, \vec{p}, \vec{u})}{\partial \vec{u}} = 0. \tag{2.10}$$

Si de plus l'équation (2.10) permet de déterminer $\vec{u}$ comme une fonction continue de $\vec{x}$ et de $\vec{p}$, alors le Hamiltonien de Pontryagin $\mathcal{H}$ a les mêmes propriétés qu'un Hamiltonien classique. Il satisfait donc les équations de Hamilton-Jacobi. Cela signifie qu'en substituant l'expression $\vec{u}(\vec{x}, \vec{p})$ dans le pseudo-Hamiltonien, on obtient un système Hamiltonien standard sur lequel on peut appliquer tous les outils de la mécanique analytique.

Si le terme p^0 de l'équation (2.6) n'est pas nul, les trajectoires solutions de (2.9) et des équations de Hamilton sont dites *normales*. Elles sont *anormales* sinon. Pour expliquer ce concept, développons les équations de Hamilton:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x}, \vec{u}, t), \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial}{\partial \vec{x}}\left(\vec{p} \cdot \vec{f}\right) - p^0 \frac{\partial f^0}{\partial \vec{x}}. \tag{2.11}$$

Dans le cas anormal, on voit que les solutions ne dépendent pas du coût car le terme $p^0 \partial f^0/\partial \vec{x}$ s'annule. Elles sont pourtant extrémales, puisqu'elles satisfont les conditions d'optimalité du PMP. Ceci peut être expliqué par le fait que le contrôle qui est solution du problème est unique, par conséquent il est optimal, puisque c'est le seul possible [5]. Dans le cas normal, on a bien des solutions qui dépendent du coût. De plus, dans ce dernier cas, le couple $(\vec{p}, p_0)$ est défini à une constante près. Si dans notre problème, le temps final t_f n'est pas fixé, on doit tenir compte d'une contrainte supplémentaire de la forme:

$$H_p(\vec{x}(t_f), \vec{p}(t_f), \vec{u}(t_f)) = -p^0 \left.\frac{\partial g}{\partial t}\right|_{t=t_f}. \tag{2.12}$$

En général, comme $g = g(\vec{x}(t_f))$ ne dépend pas explicitement du temps, cette contrainte devient $H = 0$. Un autre point important du théorème concerne les conditions de transversalité qui sont les suivantes:

— Pour un problème de type Mayer ou Mayer-Lagrange, la minimisation du terme $g(\vec{x}(t_f))$ (g ne dépend pas du temps) implique la condition suivante:

$$\vec{p}(t_f) = p^0 \left.\frac{\partial g}{\partial \vec{x}}\right|_{\vec{x}(t_f)}. \tag{2.13}$$

— Dans un problème de type Lagrange, si le point final n'est pas fixé, on a $\vec{p}(t_f) = 0$.

Dans cette thèse, nous traiterons uniquement des problèmes de contrôle bilinéaires dont la dynamique est gouvernée par:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{F}_0(\vec{x}) + \sum_{i=1}^{m} u_i \vec{F}_i(\vec{x}). \tag{2.14}$$

On remarquera que l'équation de Schrödinger est de cette forme. Le pseudo-Hamiltonien d'un système linéaire est alors donné par:

$$H_p = \vec{p} \cdot \vec{F}_0 + \sum_{i=1}^{m} u_i \vec{p} \cdot \vec{F}_i + p^0 f^0. \tag{2.15}$$

2.4 Contrôle géométrique

2.4.1 Contrôle en énergie minimum

Dans ce type de problème, on considère en général des contrôles non contraints tels que $\vec{u} \in \mathbb{R}^m$, ce qui implique que la condition de maximisation du Hamiltonien s'écrit simplement $\partial H_p/\partial \vec{u} = 0$. La fonctionnelle de coût doit décrire l'énergie utilisée par les contrôles. La fonction f^0 peut être choisie de la forme $f^0 = |\vec{u}|^2$. On s'intéresse au cas normal ($p^0 \neq 0$). En énergie minimum, le paramètre p^0 est fixé par convention à $p^0 = -1/2$. Le pseudo-Hamiltonien s'obtient en injectant (2.14) et f^0 dans (2.6), ce qui donne:

$$H_p = \vec{p} \cdot \vec{F}_0 + \sum_{i=1}^{m} u_i \vec{p} \cdot \vec{F}_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} u_i^2. \tag{2.16}$$

La condition de maximisation donne directement l'expression de chaque contrôle u_i. On a:

$$\frac{\partial H_p}{\partial u_i} = \vec{p} \cdot \vec{F}_i - u_i = 0 \Rightarrow u_i = \vec{p} \cdot \vec{F}_i. \tag{2.17}$$

Le Hamiltonien de Pontryagin est alors obtenu en substituant l'expression des champs dans le pseudo Hamiltonien. On obtient:

$$\mathcal{H} = \vec{p} \cdot \vec{F}_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (\vec{p} \cdot \vec{F}_i)^2. \tag{2.18}$$

Ce Hamiltonien ne dépend plus des contrôles et il a toutes les propriétés d'un Hamiltonien classique. Le système différentiel de l'état adjoint est donné par les équations de Hamilton (2.7). En l'intégrant, on obtient donc $\vec{p}(t)$, puis on déduit de l'expression des champs de vecteurs $\vec{F}_i$ les contrôles donnés par l'équation (2.17). A ce niveau, nous n'avons qu'une forme générale des contrôles, il reste donc à les adapter pour réaliser un transfert particulier. Le principe est donc de déterminer la trajectoire de l'espace des phases $(\vec{x}, \vec{p})$ correspondant au transfert qui nous intéresse. Par exemple, on souhaite effectuer un transfert $\vec{x}(t_0) = \vec{x}_0 \rightarrow \vec{x}(t_f) = \vec{x}_f$. Comme l'espace des $\vec{x}$ n'est qu'une projection de l'espace des phases, il peut donc exister une infinité de solutions. Cependant, si on fixe le temps final t_f, on restreint le nombre de solutions. Rappelons aussi que si l'on ne fixe pas t_f, alors le système est contraint par (2.12), ce qui est équivalent à fixer l'état adjoint à l'instant final $\vec{p}(t_f)$. Dans ce cas, on peut déterminer un (ou plusieurs) état adjoint initial $\vec{p}(0)$ qui satisfait le transfert, c'est-à-dire une trajectoire de l'espace des phases. Le vecteur $\vec{p}_0$ peut être déterminée avec une méthode de tir [24, 76] qui consiste à tester plusieurs conditions initiales $\vec{p}_0$ pour déterminer celle qui permet d'atteindre la cible à l'aide d'une méthode de Newton. Une fois que cette trajectoire est connue, nous avons les fonctions dépendantes du temps $\vec{x}(t)$ et $\vec{p}(t)$, ainsi que les contrôles associés donnés par $u_i = \vec{p} \cdot \vec{F}_i$ (Eq. (2.17)). Afin d'illustrer ce concept, nous allons appliquer le PMP à un oscillateur harmonique. Dans beaucoup d'ouvrages [5, 6, 7], le problème est traité en temps optimal avec un contrôle borné. Nous allons le résoudre ici en énergie minimum.

Exemple: *Contrôle en énergie minimum d'un pendule harmonique.*

Problème. La dynamique d'un pendule harmonique contrôlé est gouvernée par l'équation différentielle:

$$\ell \ddot{x}(t) + g x(t) - u(t) = 0, \tag{2.19}$$

avec x l'angle par rapport à la verticale, ℓ la longueur de la corde, g l'accélération de la pesanteur et $u(t)$ le contrôle (voir Fig. 2.1). On pose $\ell = 1$ et $g = 1$, ce qui revient simplement à un changement d'unités. Afin de se ramener à un système du même type que (2.14), on pose $y = \dot{x}$, ce qui transforme notre

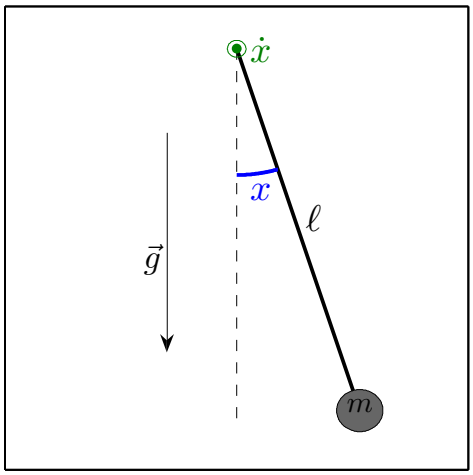

FIGURE 2.1 – Illustration d'un pendule simple.

système en un système à deux coordonnées satisfaisant:

$$\begin{cases} \dot{x} = y, \\ \dot{y} = u(t) - x(t), \end{cases} \tag{2.20}$$

Remarquons qu'en posant $\vec{X} = {}^t(x, y)$, le système est de la forme $\dot{X} = \vec{F}_0(\vec{X}) + u\vec{F}_1(\vec{X})$, avec $\vec{F}_0 = {}^t(y, -x)$ et $\vec{F}_1 = {}^t(0, 1)$. On souhaite contrôler le système d'un point initial fixé $\vec{X}(0) = \vec{X}_0 = {}^t(x_0, y_0)$ vers un point cible $\vec{X}(t_f) = \vec{X}_c = {}^t(x_c, y_c)$. On cherche à minimiser l'énergie que coûte le transfert. On choisit donc une fonctionnelle de coût de la forme

$$J = \int_0^{t_f} f^0 dt, \quad f^0 = u^2. \tag{2.21}$$

Calcul du contrôle. Le pseudo-Hamiltonien s'obtient en appliquant la formule (2.18). Dans notre cas, nous avons un seul champ. On obtient donc:

$$H_p = yp_x - xp_y + up_y - \frac{1}{2}u^2. \tag{2.22}$$

La condition de maximisation, donnée dans ce cas par $\partial H/\partial u = 0$ comme nous l'avons expliqué au début de cette section, implique $u = p_y$. Le Hamiltonien de Pontryagin est alors obtenu en substituant $u = p_y$ dans le pseudo-Hamiltonien, ce qui donne:

$$H = yp_x - xp_y + \frac{1}{2}p_y^2. \tag{2.23}$$

Pour calculer le contrôle u, on exprime la dynamique du vecteur adjoint en utilisant les équations de Hamilton.

$$\dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial x} = p_y, \quad \dot{p}_y = -\frac{\partial H}{\partial x} = -p_x. \tag{2.24}$$

Les composantes du vecteur adjoint sont donc données par $p_x = A\sin(t + \rho)$ et $p_y = A\cos(t + \rho)$. Le champ de contrôle est alors de la forme:

$$u = A\cos(t + \rho). \tag{2.25}$$

Solution générale. La forme (2.25) correspond à la forme générale du contrôle, mais les paramètres A et ρ doivent être adaptés en fonction du problème. Pour les déterminer, il est nécessaire de résoudre les équations du mouvement. En remplaçant l'expression de u dans le système (2.20), on peut intégrer le système et montrer qu'on obtient la solution générale:

$$\begin{aligned} x(t) &= c_1\cos(t) + c_2\sin(t) + \frac{A}{2}t\sin(t+\rho) \\ y(t) &= -c_1\sin(t) + c_2\cos(t) + \frac{A}{2}\Big(\sin(t+\rho) + t\cos(t+\rho)\Big). \end{aligned} \tag{2.26}$$

Solutions en partant de l'équilibre. On suppose qu'à $t = 0$, le pendule est dans sa position d'équilibre en $(x_0, y_0) = (0, 0)$. En substituant cette condition dans (2.26), on en déduit que $c_1 = 0$ et $c_2 = -A\sin(\rho)/2$. Les solutions deviennent:

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{A}{2}\Big(-\sin\rho\sin(t) + t\sin(t+\rho)\Big) \\ y(t) &= \frac{A}{2}\Big(\cos\rho\sin(t) + t\cos(t+\rho)\Big). \end{aligned} \tag{2.27}$$

Afin d'analyser la structure de ces solutions, on peut montrer que dans l'espace (x, y, t), les solutions vivent sur une certaine surface. Cette surface est paramétrée par l'équation:

$$\frac{\left[x\sin\frac{t}{2} + y\cos\frac{t}{2}\right]^2}{(t+\sin t)^2} + \frac{\left[x\cos\frac{t}{2} - y\sin\frac{t}{2}\right]^2}{(t-\sin t)^2} = \frac{A^2}{4}. \tag{2.28}$$

Pour chaque valeur de t, cette équation correspond à celle d'une ellipse centrée en $(x(t), y(t)) = (0, 0)$, dont l'axe forme un angle de $t/2$ avec l'axe y et dont l'excentricité est égale à $\sqrt{1-(b/a)^2}$ lorsque $a > b$ et $\sqrt{1-(a/b)^2}$ quand $a < b$, avec $a = t - \sin t$ et $b = t + \sin t$. Si on trace ces ellipses pour tout t, on obtient une surface en forme de vortex comme sur la figure 2.2. Pour une certaine valeur de l'amplitude A du champ, toutes les solutions qui partent de $(0, 0)$ vivent sur ce vortex.

Solution particulière à t_f fixé. Supposons que l'on souhaite atteindre l'état $(x_c, y_c) = (\pi/6, 0)$. Comme nous l'avons dit plus haut, dans l'espace des états (x, y), il existe une infinité de solutions sélectionnées par le PMP et capables de réaliser le transfert $(x_0, y_0) \to (x_c, y_c)$. Si on fixe le temps final t_f, alors on impose une contrainte supplémentaire qui permet de calculer une solution particulière. Si on ne fixe pas t_f, le PMP impose une condition de transversalité supplémentaire qui permet elle aussi de calculer une solution. Ici nous choisissons de fixer t_f.

On rappelle qu'à l'instant t_f on doit avoir $(x(t_f), y(t_f)) = (x_c, y_c) = (\pi/6, 0)$. Imposons $t_f = 3\pi$. En substituant ces conditions dans l'équation (2.28), on obtient que $A = 1/9$, ce qui fixe le vortex sur lequel vivent les solutions.

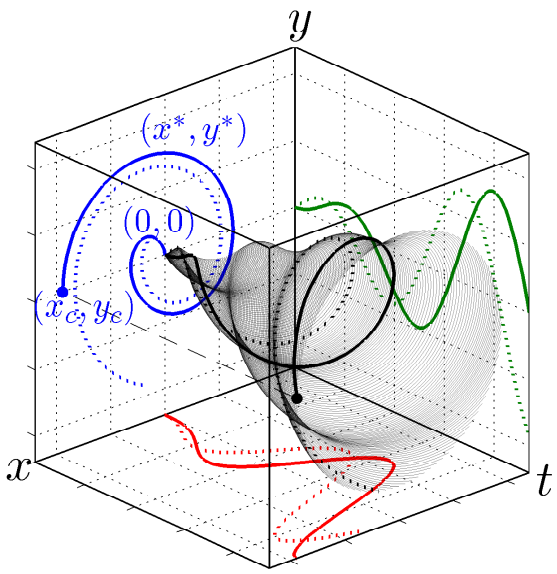

FIGURE 2.2 – Solution optimale $(x^*(t), y^*(t))$ (trait plein) pour le contrôle en énergie minimum de l'oscillateur harmonique dans l'espace (x, y, t) et projection dans les différents plans (x, y) (bleu), (x, t) (rouge), (y, t) (vert). La surface correspond au domaine d'accessibilité de l'état $\vec{X} = (x, y)$ pour un contrôle d'amplitude $A = 1/9$. Elle est donnée par l'équation (2.28). La trajectoire en pointillés est contrôlée par un champ de même amplitude que la trajectoire optimale, mais avec une phase ρ différente, ce qui fait qu'elle n'atteint pas l'état cible.

Chaque solution est donc associée à une valeur de la phase initiale ρ. Cette phase se calcule facilement en substituant la valeur de A et de t_f dans une des équations du système (2.27). On obtient $\rho = -\pi/2$.

La solution est montrée sur la figure 2.2 ainsi que le vortex correspondant à une amplitude du contrôle $A = 1/9$. La courbe en rouge représente l'évolution de x en fonction du temps, c'est-à-dire l'évolution temporelle de l'angle entre l'axe du pendule et la verticale. On remarque que le pendule oscille en prenant de plus en plus d'amplitude au cours du temps. Cela signifie qu'en partant de la position d'équilibre, le moyen le plus économique pour faire gagner de l'amplitude au pendule est de l'accompagner dans son mouvement d'oscillation, ce qui est finalement très intuitif. En effet, imaginons un pendule très lourd. Si on essaye de lui faire prendre de l'amplitude d'un seul coup, ce sera très difficile à cause de son poids. En revanche, en accompagnant son mouvement de sorte que chaque oscillation gagne en amplitude, moins d'énergie sera nécessaire. Finalement, l'énergie minimum pour réaliser le transfert $(0, 0) \to (\pi/6, 0)$ en une durée $t_f = 3\pi$ est donnée par:

$$E = \int_0^{t_f} u^2(t)dt = \int_0^{t_f} A^2 \cos^2(t + \rho)dt = \frac{3\pi A^2}{2} = \frac{\pi}{54}, \qquad (2.29)$$

dans nos unités particulières.

2.4.2 Contrôle en temps minimum

Un aspect très particulier du PMP est qu'il peut donner des contrôles continus par morceaux. Ce cas s'obtient par exemple lorsque la dynamique d'un système est contrôlée par des champs bornés, c'est-à-dire tels que chaque composante u_i du contrôle appartienne à un domaine du type $-M_i \leq u_i \leq M_i$. Pour simplifier les explications, on considère un système à deux dimensions de la forme [8]:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{F}(x_1, x_2) + u \cdot \vec{G}(x_1, x_2), \quad u \in \mathbb{R}, \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^2, \quad \vec{F} \in \mathbb{R}^2, \quad \vec{G} \in \mathbb{R}^2, \quad |u| \leq 1. \tag{2.30}$$

On souhaite atteindre un état cible $\vec{x}_c$ en temps minimum en partant du point $\vec{x}_0$. Le coût correspondant s'écrit sous la forme:

$$J = \int_{t_0}^{t_f} f^0 dt. \tag{2.31}$$

Il s'agit donc d'un problème de Lagrange (Eq. 2.2) avec $f^0 = 1$. Le pseudo-Hamiltonien est alors de la forme $\tilde{H}_p = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} + p^0$. Le deuxième terme étant une constante, on peut redéfinir le pseudo-Hamiltonien comme $H_p = \tilde{H}_p - p^0$ de façon à absorber cette constante. On obtient alors un pseudo-Hamiltonien sous la forme:

$$H_p = \vec{p} \cdot \vec{F} + u\vec{p} \cdot \vec{G}. \tag{2.32}$$

Le Hamiltonien de Pontryagin s'obtient en remarquant que le pseudo-Hamiltonien (2.32) est maximum si l'on choisit:

$$u = \text{sign}(\vec{p} \cdot \vec{G}) \equiv \text{sign}(\Phi(t)). \tag{2.33}$$

La fonction $\Phi(t)$ est appelée fonction de switch. Dans le cas régulier, le contrôle u appartient toujours au bord de son domaine de définition. Il peut passer de 1 à -1 et réciproquement. Si la fonction switch change de signe pendant la dynamique, on dit qu'il commute. La solution $\vec{x}(t)$ associée est appelée une solution bang-bang. Si elle ne change pas de signe, le contrôle est constant tout au long de la dynamique et la solution $\vec{x}(t)$ est appelée une solution bang. Dans certains cas particuliers, la fonction Φ s'annule pendant un certain temps. Le contrôle associé est dit *singulier* et ne peut pas être directement déterminé [2]. Cependant, durant cette période, on a nécessairement $\Phi = \dot{\Phi} = \cdots = 0$. On peut donc calculer la dérivée de Φ jusqu'à ce que l'expression obtenue dépende du contrôle u. La dérivée première de Φ peut s'écrire en fonction des crochets de Lie en utilisant les propriétés suivantes:

$$\begin{aligned} \dot{\Phi} &= \frac{d}{dt}(\vec{p} \cdot \vec{G}) = -\nabla_x H \cdot \vec{G} + \vec{p} \cdot (\nabla_x \vec{G})\dot{\vec{x}} \\ &= \vec{p} \cdot [\nabla_x \vec{G}(\vec{F} + u\vec{G}) - \nabla_x(\vec{F} + u\vec{G})\vec{G}] \\ &= \vec{p} \cdot [\vec{F}, \vec{G}], \end{aligned} \tag{2.34}$$

avec $\nabla_x = \partial/\partial\vec{x}$ et où les crochets de Lie sont définis comme $[A, B] = (\nabla_x A)B - (\nabla_x B)A$. La fonction $\vec{p} \cdot [\vec{F}, \vec{G}]$ dépend de la dynamique du système. Dans le meilleur des cas, la dérivée seconde dépend du contrôle u, de sorte que l'on ait:

$$\ddot{\Phi} = \vec{p} \cdot [\vec{F}, [\vec{F}, \vec{G}]] + u\vec{p} \cdot [\vec{G}, [\vec{F}, \vec{G}]] \Rightarrow u = \frac{[\vec{F}, [\vec{F}, \vec{G}]]}{[\vec{G}, [\vec{F}, \vec{G}]]}. \tag{2.35}$$

Lorsque ce type de contrôle apparaît pendant un temps $t \in [t_1, t_2]$, l'espace des phases associé est appelé le *lieu singulier*. On rappelle que sur cet intervalle, on doit avoir $\Phi = \dot{\Phi} = 0$, c'est-à-dire $\vec{p} \cdot G = \vec{p} \cdot [\vec{F}, \vec{G}] = 0$. Le lieu singulier qui satisfait cette condition vérifie:

$$\det(\vec{G}, [\vec{F}, \vec{G}])) = 0. \tag{2.36}$$

Ici, le lieu singulier est indépendant de $\vec{p}$ (les fonctions $\vec{F}$ et $\vec{G}$ ne dépendent que de $\vec{x}$).

2.4.3 Points de coupure et points conjugués

Le flot Hamiltonien engendré par le Hamiltonien de Pontryagin contient la trajectoire optimale recherchée. Celle-ci est globalement optimale lorsqu'il n'y a aucune autre trajectoire qui permette de minimiser davantage le coût. Elle est localement optimale lorsqu'elle minimise le coût parmi les trajectoires de son voisinage. Il existe des cas où une trajectoire perd son optimalité à un instant donné [77, 78]. On appelle *point de coupure* le point à partir duquel la trajectoire cesse d'être optimale. Le problème des points de coupure est un aspect très important en contrôle optimal car c'est une perte d'optimalité globale. Le *lieu de coupure* d'un point $\vec{x}_0$ est l'ensemble des points de coupure des trajectoires partant de $\vec{x}_0$. Par exemple, pour des trajectoires minimisant la distance entre deux points sur une sphère, le lieu de coupure du pôle nord de la sphère est le pôle sud de cette dernière. En effet, si l'on prolonge une géodésique sur la sphère qui atteint le pôle sud, les points qu'elle atteindra seront nécessairement atteignable par une autre trajectoire plus courte.

Un *point conjugué* est le premier point où une trajectoire perd localement son optimalité. La perte d'optimalité est locale dans le sens où la trajectoire n'est plus optimale par rapport à une trajectoire voisine. En physique, un tel point est lié aux points du portrait de phase où les trajectoires se concentrent. On retrouve ce concept en optique avec la notion de caustique. Le lieu conjugué du point $\vec{x}_0$ est l'ensemble des points conjugués de $\vec{x}_0$.

Les points conjugués sont le résultat d'une condition d'optimalité au second ordre. La définition rigoureuse de tels points nécessite d'introduire le concept de *champs de Jacobi* [77]. Soit un ensemble de trajectoires $\vec{z}_\lambda(t)$ émanant du Hamiltonien de Pontryagin qui forment une famille continûment paramétrée par λ. On considère une trajectoire particulière $\vec{z}_{\lambda_0}(t) = (\vec{x}(t), \vec{p}(t))$ et une trajectoire voisine $\vec{z}_{\lambda_0+\delta\lambda}(t)$. Le champ de Jacobi permet d'évaluer la variation des trajectoires en fonction du paramètre λ. Il vérifie:

$$\delta\vec{z}(t) = \left.\frac{\partial \vec{z}_\lambda(t)}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=\lambda_0}. \tag{2.37}$$

Un point de l'espace des états $\vec{x}(t_c)$ est conjugué au point $\vec{x}_0$ s'il existe un champ de Jacobi $\delta\vec{z}$ solution de l'équation aux variations le long de l'extrémale de référence $\vec{z}(t)$ suivante:

$$\delta\dot{\vec{z}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{z}} \cdot \delta\vec{z}, \tag{2.38}$$

non triviale ($\delta\vec{x}(t) \neq 0$) et de telle sorte que $\delta\vec{x}(0) = \delta\vec{x}(t_f) = 0$.

Des méthodes numériques ont été développées pour calculer de manière systématique la position des points conjugués. C'est le cas du code COTCOT [79] développé à l'université de Bourgogne. Dans cette thèse, nous nous contenterons d'utiliser des méthodes au premier ordre. Nous ne chercherons pas à déterminer la position des points conjugués et des points de coupure. Pour les problèmes physiques étudiés dans ce manuscrit, les conditions au premier ordre seront suffisantes, notamment pour les implémentations expérimentales. Dans le cas de systèmes complexes, il est de toute façon très difficile (et peu utile en pratique) de déterminer l'optimalité globale ou locale des trajectoires.

2.5 Contrôle numérique

2.5.1 Introduction

Lorsque le système a trop de dimensions pour pouvoir être traité géométriquement, il est nécessaire de faire appel à des méthodes numériques permettant de déterminer des solutions optimales. Le principal avantage d'une méthode numérique est de pouvoir traiter des modèles beaucoup plus réalistes que des modèles simples à deux ou trois dimensions. Les champs de contrôle calculés numériquement sont voués à être directement implémentés sur des dispositifs expérimentaux. Elles permettent, entre autres, de calculer des solutions robustes par rapport aux imperfections expérimentales. Il existe typiquement trois types d'approche. Les algorithmes génétique ou d'évolution [80, 81, 82] sont des méthode à l'ordre 0 qui sont utiles lorsque l'on n'a aucune idée des stratégies de contrôle adaptées au problème. En partant d'un certains nombre de contrôles choisis aléatoirement, ces algorithmes améliorent au fur et à mesure les champs de contrôle à partir d'un principe général d'évolution issus de la génétique et de la théorie de Darwin. Les méthodes numériques à l'ordre 1 basées sur un calcul de gradient permettent de déterminer un optimum local. Elles améliorent petit à petit la solution jusqu'à ce qu'elle soit optimale. Cet optimum n'est pas atteint avec une très grande précision. Pour l'atteindre avec la précision numérique, il est nécessaire d'utiliser des approches au second ordre qui utilisent des algorithmes de Newton [24, 83]. Le choix de la méthode doit être fait selon le système traité et l'objectif souhaité. Pour les travaux que nous allons réaliser, les méthodes à l'ordre 1 seront suffisantes. Les expérience menées ne permettent pas de faire des mesures extrêmement précises, mais les systèmes sont suffisamment simples pour avoir une bonne idée des stratégies de contrôle à mettre en place.

Il existe aujourd'hui plusieurs algorithmes à l'ordre 1 utilisés en mécanique quantique. Ils sont basés sur des méthodes de type gradient [25], ou de type Krotov [69, 84]. Dans

ces algorithmes, le principe est d'optimiser les champs de contrôle de manière itérative afin que le système soit le plus proche possible d'un état cible à l'instant t_f. Dans un algorithme numérique, le temps est discrétisé en N pas. On considère donc un champ de contrôle constant par morceaux de longueurs $t_{n+1} - t_n$. Le champ de contrôle est donc décomposé en N paramètres $u(t_n)$. Dans une méthode du gradient, tous les paramètres $u(t_n)$ sont optimisés simultanément. Par contre, dans une méthode de type Krotov, les $u(t_n)$ sont optimisés séquentiellement. Les deux méthodes ont donc des profils de convergence différents [38]. Dans tous les cas, ces algorithmes sont des méthodes de premier ordre. La cible n'est donc généralement pas atteinte avec une très grande précision. Cependant, elles peuvent être étendues à des méthodes du second ordre, afin d'améliorer la précision du résultat [83, 85, 86]. Un des aspects négatifs de ces algorithmes est qu'ils nécessitent de résoudre les équations du mouvement à chaque itération, afin de connaître l'état du système à l'instant final. Les équations du mouvement sont intégrées grâce à des algorithmes de propagation qui sont coûteux en temps de calcul. Par conséquent, ce point peut-être un problème pour des systèmes plus complexes comme des ensembles de spins couplés ou d'autres systèmes de très grande dimension. Plusieurs algorithmes ont été mis au point pour contourner ce problème. Citons par exemple l'algorithme CRAB (Chopped Random Basis) [70, 71], qui permet de traiter des systèmes composés de nombreux spins couplés en diminuant considérablement le nombre de propagations.

Une autre approche possible pour limiter les temps de calcul est de contraindre les champs de contrôle à garder une certaine forme analytique. Cela permet d'optimiser un nombre moindre de paramètres et donc de converger plus vite vers un optimum. Selon la paramétrisation choisie, cette méthode peut aussi permettre de réduire considérablement le temps de calcul lié à la propagation. Dans ce cadre, la méthode des pulses composites [54, 87] fait intervenir des champs de contrôle si simples qu'elle permet de résoudre analytiquement les équations du mouvement. L'algorithme de Shinnar le Roux, quant à lui, utilise des impulsions de durée très courte appliquées successivement, ce qui permet de découpler la dynamique liée aux inhomogénéités du champ $\vec{B}_0$ de celle due au champ de contrôle radiofréquence, puis d'écrire la solution comme un polynôme dont les coefficients peuvent être optimisés pour atteindre un certain profil de robustesse [88, 89].

Dans cette thèse, nous nous servirons de l'algorithme GRAPE (Gradient Ascent Pulse Engineering [25]) qui est une méthode du gradient. Nous utiliserons GRAPE pour optimiser des fonctions analytiques afin de calculer des solutions relativement simples et de garder ainsi des arguments physiques sur le mécanisme de contrôle. Dans une optimisation numérique, nous adaptons toujours l'algorithme à un problème de type Mayer ou Mayer-Lagrange, mais jamais directement à un problème de type Lagrange car nous avons besoin d'une fonctionnelle de coût qui dépend de l'état final du système. En d'autres termes, nous définissons toujours dans le coût une fonction du type $g(\vec{x}(t_f))$ qui traduit le fait que nous souhaitons toujours nous rapprocher au mieux d'un état cible, en minimisant éventuellement l'énergie ou d'autres grandeurs qui dépendent du temps.

2.5.2 Méthode du gradient

La méthode du gradient consiste à déterminer le minimum (ou le maximum) d'une fonction qui dépend de un ou plusieurs paramètres [90]. Dans notre cas, nous cherchons des contrôles $u_k(t)$ qui minimisent une fonction J. Pour simplifier les explications, on ne considère qu'un seul contrôle $u(t)$. Dans un algorithme numérique, le temps t est discrétisé et composé de N valeurs de sorte que $t \in \{t_1, ..., t_N\}$. Le problème du gradient consiste alors à trouver l'ensemble des $u(t_n) \equiv u_n$ qui minimisent la fonctionnelle de coût $J = J(u_1, ..., u_n)$. Le principe est le suivant. On initialise arbitrairement tous les u_n. A chaque itération, l'algorithme modifie légèrement chaque paramètre u_n pour que le coût diminue systématiquement. Plus précisément, on a:

$$u_n^{(i+1)} = u_n^{(i)} + \epsilon \left.\frac{\partial J}{\partial u}\right|_{u=u_n} \tag{2.39}$$

Le nom de "méthode du gradient" vient du fait que nous ajoutons à chaque itération le gradient $\partial J/\partial u_n$ multiplié par un petit paramètre $\epsilon < 0$ (dans le cas où on cherche à maximiser J, on a $\epsilon > 0$). Si ϵ est suffisamment petit, le coût à l'itération $i+1$ est forcément plus petit que celui à l'itération i. Pour le montrer, notons $\vec{v}$ le vecteur ${}^t(u_1, ..., u_N)$. En faisant un développement limité au premier ordre en ϵ, on a:

$$J^{(i+1)} = J\left(\vec{v}^{(i)} + \epsilon\frac{\partial J}{\partial \vec{v}}\right) = J^{(i)} + \epsilon\left|\frac{\partial J}{\partial \vec{v}}\right|^2 + O(\epsilon^2) < J^{(i)}, \tag{2.40}$$

qui est vrai tant que les termes en ϵ^2 sont négligeables, c'est-à-dire tant que ϵ (qui est ici négatif) est suffisamment proche de zéro. Lorsque J atteint un minimum, alors le gradient $\partial J/\partial \vec{v}$ est nul et les u_n sont optimaux. La fonction $J(u_1, ..., u_N)$ peut admettre plusieurs minima, mais l'algorithme ne converge que vers un minimum voisin de la configuration initiale choisie $\{u_1^{(ini)}, ..., u_N^{(ini)}\}$. La solution dépend donc de notre initialisation, il s'agit d'un optimum local, qui n'est pas forcément le minimum global. Cette situation est illustrée sur la figure 2.3.

En pratique, le paramètre ϵ est un paramètre que l'on ajuste pour que l'algorithme converge vers un optimum assez rapidement. Si on le choisit très petit, on peut être sûr que l'on atteindra l'optimum voisin, mais en un nombre d'itérations très élevé et donc un temps de calcul très long. Si ϵ est trop grand, alors les paramètres u_n varient trop entre chaque itération et l'algorithme n'arrive pas à converger, car les termes en ϵ^2 ne sont pas négligeables et donc la relation (2.40) n'est pas valable. Dans un régime intermédiaire, le coût diminue de manière monotone en fonction du nombre d'itérations. Le paramètre ϵ peut être déterminé avec une méthode de linesearch [90], qui calcule pour chaque itération la valeur de ϵ tel que $J^{(i)} - J^{(i+1)}$ soit maximal, c'est-à-dire de sorte que le coût diminue le plus possible entre les itérations (i) et $(i+1)$. Cependant, ce type de méthode a aussi un coût numérique important. On peut aussi mettre en œuvre une méthode de gradient conjugué qui permet de calculer ϵ de façon à converger plus vite [24].

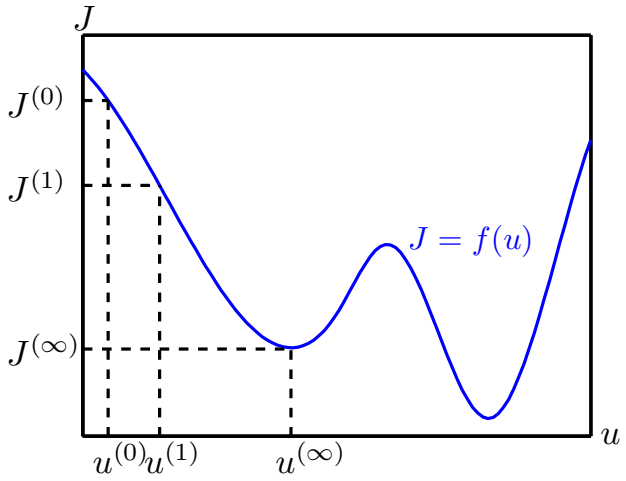

FIGURE 2.3 – Illustration de la méthode du gradient. Sur cette figure, nous avons pris un coût dépendant d'un seul paramètre. En partant d'une condition initiale arbitraire (à laquelle est associé un coût $J^{(0)}$), le gradient converge vers un minimum local, qui n'est pas forcément le minimum global.

2.5.3 Algorithme GRAPE

Méthode

L'algorithme GRAPE fonctionne exactement de la même manière. Sa particularité intervient dans le calcul des gradients $\partial J/\partial u$. Pour le comprendre, on considère le problème standard du contrôle d'un système à deux niveaux. Dans cet exemple, l'état du système est décrit par un vecteur $|\lambda(t)\rangle$ composé de deux coordonnées complexes. Sa dynamique est gouvernée par l'équation de Schrödinger suivante:

$$\frac{d}{dt}|\lambda(t)\rangle = -iH(t)\,|\lambda(t)\rangle\,, \tag{2.41}$$

où l'on a posé $\hbar = 1$. L'opérateur Hamiltonien s'écrit sous la forme:

$$H(t) = H_0 + u(t)H_c. \tag{2.42}$$

H_0 représente l'interaction du système avec le champ statique $\vec{B}_0$ et $u(t)H_c$ l'interaction avec le champ de contrôle radiofréquence. Supposons que l'on souhaite minimiser une fonctionnelle de coût de la forme:

$$J = g(|\lambda(t_f)\rangle) + \int_{t_0}^{t_f} f^0(u(t), t), \tag{2.43}$$

où g et f^0 sont des fonctions arbitraires et t_f est fixé (problème de type Mayer-Lagrange). Le principe est d'optimiser le champ $u(t)$ de façon à minimiser J.

La première étape consiste à discrétiser le problème, en introduisant un ensemble d'instants de la forme:

$$t \in [t_0, t_f] \Rightarrow t \in \{t_0, t_1, t_2, \cdots, t_N\}, \tag{2.44}$$

où N est un entier arbitraire. Ainsi, le contrôle $u(t)$ se décompose en N paramètres $u(t_n) = u_n$. Il s'agit donc d'une fonction constante par morceaux de longueur $dt = t_{n+1} - t_n$. A chaque itération k, on souhaite appliquer la relation (2.39) sur l'ensemble des u_n de manière à ce que $J^{(k+1)} < J^{(k)}$. Le champ de contrôle et l'opération (2.39) sont illustrés sur la figure 2.4.

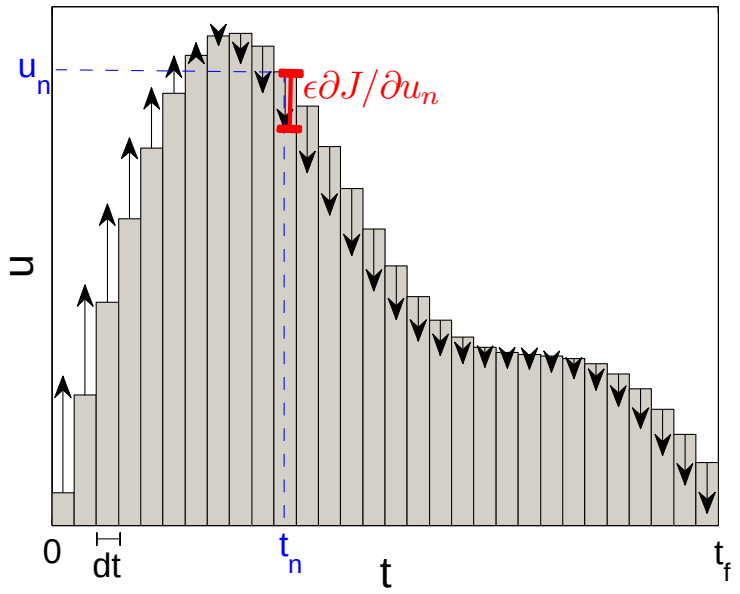

FIGURE 2.4 – Champ de contrôle en fonction du temps discrétisé. Le programme ajoute à chaque itération la quantité $\epsilon\partial J/\partial u_n$ pour tout n.

Résolution numérique des équations du mouvement

A l'instant $t_1 = t_0 + dt$, l'état du système peut être calculé car le champ étant constant sur l'intervalle $[t_0, t_0 + dt]$, la solution $|\lambda(t_0 + dt)\rangle$ est connue et elle est donnée par:

$$|\lambda(t_0 + dt)\rangle = e^{-iH_1 dt} |\lambda(t_0)\rangle . \tag{2.45}$$

où $H_1 = H_0 + u_1 H_c$ est l'opérateur Hamiltonien entre les instants t_0 et t_1. Ainsi, l'état du système est connu de proche en proche jusqu'à l'instant $t_f = t_N$, puisqu'il vérifie:

$$|\lambda(t_N)\rangle = U_N \cdot U_{N-1} \cdots U_1 |\lambda(t_0)\rangle , \tag{2.46}$$

avec $U_n = e^{-iH_n dt}$. U_n est donc une exponentielle de matrice qui coûte cher en temps de calcul. De plus, nous allons voir que le calcul des gradients nécessite de calculer la dérivée de la matrice U_n par rapport aux champs de contrôle. Il est donc indispensable de trouver une forme plus appropriée de U_n. Pour un système à deux niveaux sans relaxation, l'opérateur U_n peut être calculé analytiquement, ce qui permet d'améliorer la vitesse de la propagation numérique et de calculer les gradients sans problème. Mais pour être plus général, nous allons introduire dans un prochain paragraphe plusieurs méthodes pour développer U_n.

État adjoint

Dans la section 2.3, nous avons vu que le PMP stipule qu'il existe un vecteur adjoint, et que dans un problème de type Mayer ou Bolza la minimisation implique la condition de transversalité (2.13). On introduit l'état adjoint du système $|\chi(t)\rangle$. La condition de transversalité (2.13), prise pour $p^0 = -1$, s'écrit sous la forme:

$$|\chi(t_f)\rangle = -\left.\frac{\partial g(|\lambda(t_f)\rangle)}{\partial |\lambda\rangle}\right|_{|\lambda\rangle=|\lambda(t_f)\rangle}. \tag{2.47}$$

Par exemple, supposons que la fonction g soit donnée par $g(|\lambda(t_f)\rangle) = 1 - |\langle\lambda_c|\lambda(t_f)\rangle|^2$, où λ_c est un état cible. On a alors:

$$\begin{aligned} |\chi(t_f)\rangle &= -\frac{\partial}{\partial |\lambda(t_f)\rangle}\Big[1 - \langle\lambda(t_f)|\lambda_c\rangle\langle\lambda_c|\lambda(t_f)\rangle\Big] \\ &= \langle\lambda(t_f)|\lambda_c\rangle \begin{pmatrix} \frac{\partial[x_c^* x(t_f) + y_c^* y(t_f]}{\partial x(t_f)} \\ \frac{\partial[x_c^* x(t_f) + y_c^* y(t_f)]}{\partial y(t_f)} \end{pmatrix} = \langle\lambda(t_f)|\lambda_c\rangle \begin{pmatrix} x_c^* \\ y_c^* \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.48}$$

Cette condition nous donne donc la valeur de l'état adjoint à l'instant final, i.e. $|\chi(t_f)\rangle$. Celui-ci peut être connu pour tout t, en résolvant les équations d'Hamilton appliquées au pseudo-Hamiltonien du système donné par $H_p = \langle\chi|\frac{d}{dt}|\lambda\rangle$, c'est-à-dire:

$$\frac{d}{dt}|\chi\rangle = -\frac{\partial H_p}{\partial |\lambda\rangle}. \tag{2.49}$$

Calcul des gradients

On rappelle que pour que le coût diminue à chaque itération, l'algorithme doit procéder selon l'équation (2.39), ce qui nécessite de calculer le gradient $\partial J/\partial u_n$. Or, en considérant un coût qui ne dépend que de l'état final, ce gradient vérifie:

$$\frac{\partial J}{\partial u_n} = \frac{\partial J}{\partial |\lambda(t_N)\rangle} \cdot \frac{\partial |\lambda(t_N)\rangle}{\partial u_n}. \tag{2.50}$$

On rappelle que $t_N = t_f$. Le coût J donné par l'équation (2.43) montre que seule la fonction g dépend de $|\lambda(t_N)\rangle$. Par conséquent, le premier facteur du gradient est donné par $\frac{\partial J}{\partial|\lambda(t_N)\rangle} = \frac{\partial g}{\partial|\lambda(t_N)\rangle}$. Cette équation correspond à la condition de transversalité (2.13) imposée par le PMP. Ce terme correspond au vecteur adjoint à l'instant final, que l'on note $|\chi(t_N)\rangle$. Le second facteur du gradient s'écrit sous la forme:

$$\frac{\partial |\lambda(t_N)\rangle}{\partial u_n} = U_N \cdots U_{n+1} \frac{\partial U_n}{\partial u_n} U_{n-1} \cdots U_1 |\lambda(t_1)\rangle. \tag{2.51}$$

Le gradient $\partial J/\partial u_n$ est donc le produit scalaire entre l'état adjoint à l'instant final et cette équation, c'est-à-dire:

$$\frac{\partial J}{\partial u_n} = \underbrace{\langle\chi(t_N)| U_N \cdots U_{n+1}}_{\langle\chi(t_{n+1})|} \frac{\partial U_n}{\partial u_n} \underbrace{U_{n-1} \cdots U_1 |\lambda(t_1)\rangle}_{|\lambda(t_{n-1})\rangle}. \tag{2.52}$$

L'algorithme nécessite donc de calculer $\langle\chi(t_{n+1})|$ et $|\lambda(t_{n-1})\rangle$. Le premier s'obtient en faisant une propagation arrière à partir de $\langle\chi(t_N)|$. Le second s'obtient grâce à une propagation avant suivant l'équation (2.46). Pour connaître ces deux objets pour tout t_n, il est nécessaire de faire une propagation avant et une arrière. Ainsi, pour chaque itération, le programme nécessite deux propagations.

On rappelle que le propagateur U_n est donné par $U_n = e^{-iH_n dt}$. Comme nous l'avons dit plus haut, la dérivée partielle $\partial U_n/\partial u_n$ nécessite que la matrice U_n soit exprimée sous une autre forme afin de pouvoir calculer la dérivée. Nous donnons ci-dessous trois méthodes qui permettent de calculer $\partial U_n/\partial u_n$.

Gradient exact. Cette méthode est valable uniquement pour un système à deux niveaux. On rappelle que les champs de contrôle sont constants sur chaque intervalle de longueur dt. On considère que la dynamique du système entre les instants t_n et t_{n+1} est gouvernée par un opérateur hamiltonien de la forme:

$$H_n = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} \delta & u_{x,n} - iu_{y,n} \\ u_{x,n} + iu_{y,n} & -\delta \end{pmatrix}. \tag{2.53}$$

On définit le vecteur normé suivant:

$$\vec{\omega}_n = \frac{1}{\sqrt{\delta^2 + u_{x,n}^2 + u_{y,n}^2}}\begin{pmatrix} u_{x,n} \\ u_{y,n} \\ \delta \end{pmatrix}. \tag{2.54}$$

Le Hamiltonien H_n peut s'écrire en fonction des matrices de Pauli suivant la formule $H_n = -\frac{1}{2}\sqrt{\delta^2 + u_{x,n}^2 + u_{y,n}^2}\vec{\omega}\cdot\vec{\sigma}$, où les composantes de $\vec{\sigma}$ sont les matrices de Pauli. En posant $\Omega_n = \sqrt{\delta^2 + u_{x,n}^2 + u_{y,n}^2}$, on peut montrer que le propagateur U_n s'écrit:

$$U_n = e^{-iH_n dt} = \cos\left(\frac{\Omega_n dt}{2}\right)\mathbb{1} + i\sin\left(\frac{\Omega_n dt}{2}\right)(\vec{\omega}\cdot\vec{\sigma}). \tag{2.55}$$

Finalement, en dérivant cette expression par rapport aux champs de contrôle, on obtient:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_n}{\partial u_{x,n}} &= -i\sigma_x dt U_n \\ \frac{\partial U_n}{\partial u_{y,n}} &= -i\sigma_y dt U_n. \end{aligned} \tag{2.56}$$

Suivant la relation (2.52), les gradients sont donnés par:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial u_{x,n}} &= -idt\,\langle\chi(t_{n+1})|\sigma_x|\lambda(t_n)\rangle\,, \\ \frac{\partial J}{\partial u_{y,n}} &= -idt\,\langle\chi(t_{n+1})|\sigma_y|\lambda(t_n)\rangle\,. \end{aligned} \tag{2.57}$$

Les formules (2.55), (2.56), et (2.57) sont exactes. Par conséquent, l'unique approximation est d'avoir considéré un champ constant par morceaux, ce qui est de toute façon le cas dans les expériences de RMN [25].

Split opérator. Celui-ci s'applique pour des systèmes linéaires de la forme $\dot{\vec{x}} = M\vec{x}$, où $M = M_0 + \sum_{k=1}^{m} u_m M_m$ [91]. Pour simplifier les explications, on considère le même système que précédemment, c'est-à-dire un système à deux niveaux dont l'opérateur Hamiltonien est donné par (2.53). Celui-ci peut se réécrire sous la forme $H_n = -\frac{1}{2}\Big(u_{x,n}\sigma_x + u_{y,n}\sigma_y + \delta\sigma_z\Big)$. Si dt est suffisamment petit, on peut montrer que le propagateur U_n est de la forme:

$$U_n = e^{-iH_n dt} = e^{-i\delta dt\sigma_z} e^{-iu_{x,n}dt\sigma_x} e^{-iu_{y,n}dt\sigma_y} + O(dt^2). \tag{2.58}$$

Il est possible de développer ce terme jusqu'à des ordres supérieurs afin que le reste soit d'ordre plus élevé en dt. Si les matrices dans les exponentielles sont hermitiennes, on peut développer chacun de ces termes analytiquement. Dans notre cas, cela donne:

$$\begin{aligned} e^{-i\delta dt\sigma_z} &= \begin{pmatrix} e^{-i\delta dt} & 0 \\ 0 & e^{i\delta dt} \end{pmatrix}, \\ e^{-iu_{x,n}dt\sigma_x} &= \begin{pmatrix} \cos(u_{x,n}dt) & -i\sin(u_{x,n}dt) \\ -i\sin(u_{x,n}dt) & \cos(u_{x,n}dt) \end{pmatrix}, \\ e^{-iu_{y,n}dt\sigma_y} &= \begin{pmatrix} \cos(u_{y,n}dt) & -\sin(u_{y,n}dt) \\ \sin(u_{y,n}dt) & \cos(u_{y,n}dt) \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.59}$$

D'une manière générale, une matrice Hermitienne M peut s'écrire sous la forme $M = P\,\mathrm{diag}[x_1, \cdots, x_n]P^\dagger$, où les x_n sont les valeurs propres de M et P la matrice de passage vers la base propre de la matrice M. Son exponentielle est alors donnée par: $e^M = P\,\mathrm{diag}[e^{x_1}, \cdots, e^{x_n}]P^\dagger$. Le propagateur U_n étant donné par (2.58), on peut calculer ses dérivées partielles par rapport aux champs de contrôle. On obtient la même formule que dans l'équation (2.56). Il en va de même pour les gradients $\partial J/\partial u_{x,n}$ et $\partial J/\partial u_{y,n}$. Ici l'erreur commise est de l'ordre de dt^2. Cette méthode est donc d'autant plus efficace que dt est petit, c'est-à-dire que le nombre de pas de temps N choisi est grand. Cependant, plus le paramètre N est grand et plus les propagations sont longues, car on rappelle que le programme nécessite la connaissance des états $|\lambda(t)\rangle$ et $|\chi(t)\rangle$. Le propagateur est un produit de trois matrices, ce qui prend un temps important à calculer.

Développement de Taylor. Pour un système du type $\dot{\vec{x}} = H(t, u(t))\vec{x}$, le propagateur $U_n = e^{Hdt}$ peut se développer comme une série de Taylor. On considère de nouveau le système à deux niveaux d'énergie. Le développement de Taylor du propagateur vérifie:

$$U_n = e^{-iH_n dt} = \sum_{m=0}^{M} (-i)^m dt^m \frac{H_n^m}{m!} + O(dt^{M+1}), \tag{2.60}$$

où M est un paramètre arbitraire qui contrôle la précision de l'approximation. M. Lapert a remarqué que l'algorithme de propagation peut s'écrire, entre les instants t_n et t_{n+1}, sous la forme:

$$|\lambda(t_{n+1})\rangle = e^{-iH_n dt}\,|\lambda(t_n)\rangle = \sum_{m=0}^{M} |\Lambda_m\rangle\,, \tag{2.61}$$

avec $|\Lambda_{m+1}\rangle = dt/(m+1)\,|\Lambda_m\rangle$ et $|\Lambda_0\rangle = |\lambda(t_n)\rangle$. Cela permet d'éviter de calculer des puissances de matrice qui prennent beaucoup de temps numériquement. Il faut faire attention car l'erreur n'est pas simplement en $o(dt^{M+1})$. Le développement de Taylor fait perdre l'unitarité du propagateur et il faut donc choisir M suffisamment grand pour que l'approximation soit bonne. Dans le programme, on introduit un seuil ϵ_m, qui permet de sortir de la boucle (2.61) si la condition suivante est satisfaite:

$$\langle\Lambda_{m+1}|\lambda_{m+1}\rangle + \langle\Lambda_m|\Lambda_m\rangle < \epsilon_m. \tag{2.62}$$

Dans notre modèle, on a $\partial H_n/\partial u_{x,n} = \sigma_x$ et $\partial H_n/\partial u_{y,n} = \sigma_y$. En exprimant les dérivées partielles du propagateur par rapport aux champs de contrôle, on obtient les mêmes gradients que ceux de l'équation (2.57).

Algorithme

Nous allons maintenant détailler la construction de l'algorithme. Pour simplifier, considérons de nouveau un système contrôlé par deux champs $u_x(t)$ et $u_y(t)$. Le temps est discrétisé en N pas. Les variables discrètes sont données par:

$$t \in \{t_0, \cdots, t_N\}, \quad u_x(t_n) = u_{x,n}, \quad u_y(t_n) = u_{y,n}. \tag{2.63}$$

On rappelle qu'à chaque itération k, le programme réalise l'opération suivante:

$$u_{x,n}^{k+1} = u_{x,n}^{k} + \epsilon \left.\frac{\partial J}{\partial u_x}\right|_{u_x=u_{x,n}}, \quad u_{y,n}^{k+1} = u_{y,n}^{k} + \epsilon \left.\frac{\partial J}{\partial u_y}\right|_{u_y=u_{y,n}}. \tag{2.64}$$

On prend un exemple où le coût J est défini par:

$$J = 1 - \Re(\langle\lambda_c, \lambda(t_N)\rangle), \tag{2.65}$$

où $|\lambda_c\rangle$ est un état cible et $|\lambda(t_N)\rangle$ l'état du système à l'instant final. A l'instant $t_f = t_N$, le vecteur adjoint vérifie:

$$|\chi(t_N)\rangle = \frac{\partial J}{\partial\,|\lambda(t_N)\rangle} = -\Re(|\lambda_c\rangle). \tag{2.66}$$

L'algorithme se déroule de la façon suivante:

- ▷ Initialisation des champs de contrôle $u_{x,n}$ et $u_{y,n}$ pour tout n et choix d'un paramètre ϵ qui détermine la vitesse de convergence.
- ▷ Pour k allant de 1 à $k_{\max}$:
  - ▷ Propagation en avant de l'état $|\lambda\rangle$ à partir de $|\lambda(t_0)\rangle$ suivant la formule:

    $$|\lambda(t_n)\rangle = U_n \cdots U_1\,|\lambda(t_0)\rangle\,,$$

    où U_n est le propagateur développé selon une méthode au choix (par exemple le split operator). Sauvegarde de chacun des $|\lambda(t_n)\rangle$.

▷ Propagation en arrière de l'état adjoint à partir de $|\chi(t_N)\rangle$, suivant:

$$\langle\chi(t_n)| = \langle\chi(t_N)|\, U_N \cdots U_n,$$

et sauvegarde des $\langle\chi(t_n)|$ pour tout n.

▷ Calcul des gradients donnés par:

$$\frac{\partial J}{\partial u_{x,n}} = -idt\, \langle\chi(t_{n+1})|\sigma_x|\lambda(t_n)\rangle\,, \quad \frac{\partial J}{\partial u_{y,n}} = -idt\, \langle\chi(t_{n+1})|\sigma_y|\lambda(t_n)\rangle\,.$$

▷ Mise à jour des champs de contrôle en appliquant la formule (2.64).

▷ Fin de la boucle

2.5.4 Optimisation de fonctions paramétrées

Jusqu'à présent, nous avons supposé que les paramètres à optimiser sont des termes de la forme $u(t_n)$, soit N paramètres pour chaque contrôle (voir Fig. 2.4). N est en général de l'ordre de plusieurs centaines voire milliers. Par conséquent, les champs de contrôle obtenus ne sont en général pas faciles à interpréter. Il existe cependant un moyen d'utiliser GRAPE de manière à garder une forme analytique des contrôles, en optimisant un petit nombre de paramètres [92]. L'efficacité du résultat dépend alors de notre intuition à choisir des contrôles bien paramétrés, de manière à ce qu'ils soient adaptés au problème. Supposons que nous souhaitons optimiser un champ de contrôle qui soit une fonction linéairement paramétrée de la forme:

$$u(t) = a_1 f_1(t) + a_2 f_2(t) + \cdots + a_M f_M(t). \tag{2.67}$$

Plutôt que d'optimiser N paramètres u_n, on optimisera chaque paramètre a_j, c'est-à-dire M paramètres. Bien sûr, le but est que M soit petit, de sorte que nous puissions exprimer analytiquement les contrôles. A chaque itération, nous souhaitons modifier les paramètres suivant la formule:

$$a_j^{(k+1)} = a_j^{(k)} + \epsilon \frac{\partial J}{\partial a_j}. \tag{2.68}$$

Lorsque le temps est continu, ce gradient s'écrit:

$$\frac{\partial J}{\partial a_j} = \int_{t_0}^{t} \frac{\partial J}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial a_j}\bigg|_t dt. \tag{2.69}$$

Comme nous avons toujours besoin de discrétiser le temps pour les propagations, nous avons finalement:

$$a_j^{(k+1)} = a_j^{(k)} + \epsilon \sum_{n=1}^{N} . \frac{\partial J}{\partial u_n} \frac{\partial u_n}{\partial a_j}. \tag{2.70}$$

Le calcul des dérivées $\partial J/\partial u_n$ se fait comme précédemment, grâce à une propagation de l'état et de l'état adjoint du système. Comme u est une fonction analytique des a_j,

les termes $\partial u/\partial a_j$ sont calculés explicitement. Par exemple, pour une paramétrisation de type (2.67), on a:

$$\partial u_n/\partial a_j = f_j(t_n), \tag{2.71}$$

et l'équation (2.70) devient:

$$a_j^{(k+1)} = a_j^{(k)} + \epsilon \sum_{n=1}^{N} . \frac{\partial J}{\partial u_n} f_j(t_n). \tag{2.72}$$

Le paramètre ϵ est choisi de façon à ce que le coût converge de manière monotone et suffisamment rapide vers un minimum.

2.6 Solide en rotation

2.6.1 Équation générale

Dans cette thèse, nous étudierons souvent des systèmes dynamiques dont les solutions appartiennent au groupe unitaire $SO(3)$, qui est le groupe de toutes les rotations autour de l'origine d'un espace Euclidien de dimension trois. Les *équations de Bloch sans relaxation* en sont un exemple. Pour comprendre une telle dynamique, nous allons traiter le cas d'un solide quelconque en rotation autour de son centre de masse. Nous rappelons dans ce paragraphe quelques résultats de la mécanique classique qui sont développés dans différents ouvrages de référence [75, 93, 94]. Nous allons donner une démonstration élémentaire des équations qui nous intéresse.

On considère un solide en rotation autour de son centre de masse et un vecteur unitaire quelconque $\vec{x}$ attaché au solide. A chaque instant t, le solide tourne autour d'un axe repéré par le vecteur unitaire $\vec{n}$ à une vitesse $\dot{\alpha}$.

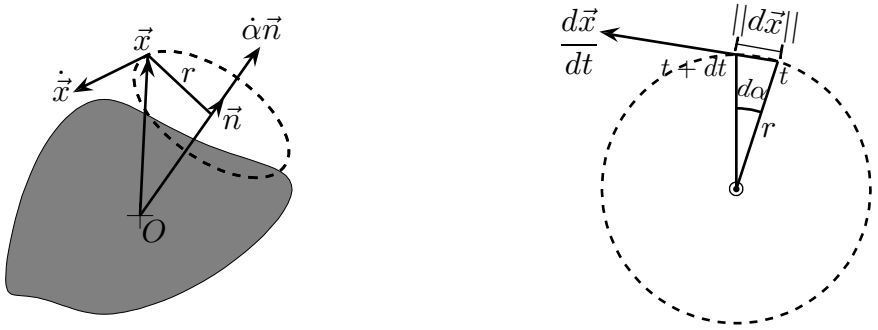

FIGURE 2.5 – *À gauche:* Mouvement du solide autour de son axe de rotation à un instant t. $\vec{x}$ est un vecteur unitaire attaché au solide et $\vec{n}$ est l'axe de rotation du solide à l'instant t. *A droite:* Rotation infinitésimale du vecteur $\vec{x}$ entre les instants t et $t + dt$ sur le cercle de rayon r.

Le vecteur $\vec{x}$ décrit un cercle au cours de sa dynamique de rayon $r = ||\vec{n} \times \vec{x}||$. Par conséquent $d\vec{x}$ est perpendiculaire au plan engendré par $\vec{x}$ et $\vec{n}$. On a donc $d\vec{x} = ||d\vec{x}|| \frac{\vec{n}\times\vec{x}}{||\vec{n}\times\vec{x}||}$, et $||d\vec{x}|| = dr = rd\alpha = ||\vec{n} \times \vec{x}||d\alpha$. En définissant la vitesse angulaire $\vec{\Omega} = \dot{\alpha}\vec{n}$, on obtient finalement:

$$\dot{\vec{x}}(t) = \vec{\Omega}(t) \times \vec{x}(t). \tag{2.73}$$

Remarquons que $\dot{\alpha}$ est le même pour n'importe quel vecteur attaché au solide, ce qui implique que cette relation est vraie pour n'importe quel vecteur du solide. On peut donc définir un repère orthonormé $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ attaché au solide et dont chacun des axes a une dynamique gouvernée par l'équation (2.73). Le mouvement du solide dépend entièrement de $\vec{\Omega}(t)$.

Nous aurons aussi besoin de connaître la dynamique d'un vecteur fixe attaché au laboratoire vue depuis le corps en rotation, qui est donnée par la même équation au signe près. En appelant $\vec{X}$ un axe attaché au laboratoire, sa dynamique dans le référentiel du corps solide est donnée par:

$$\dot{\vec{X}} = \vec{X} \times \vec{\Omega}. \tag{2.74}$$

Nous verrons que dans le cas où le solide est en rotation libre les composantes de $\vec{\Omega}$ sont reliées à celles du moment cinétique du solide et que cette équation est *l'équation d'Euler*. Si $\vec{\Omega}$ est un contrôle, on remarque que cette équation est la même que l'équation de Bloch sans relaxation que nous avons vu dans le chapitre 1.

2.6.2 Angles d'Euler

La dynamique de ce type de problème décrit la rotation d'un repère. Il est pratique d'utiliser un jeu de coordonnées appelé les angles d'Euler, trois angles qui permettent de décrire la position des trois axes d'un repère dans un autre. Il existe différents choix pour ces angles et il est important de faire un choix bien adapté au problème afin que la dynamique de chaque angle puisse se comprendre de manière intuitive. Dans cette thèse, nous utiliserons plusieurs choix d'angles, mais nous les construirons toujours de la même manière, suivant la convention dite ZYZ. On définit le repère $\mathcal{S} = (\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ attaché au solide, et $\mathcal{L} = (\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$ le repère du laboratoire. Le passage de $\mathcal{L}$ à $\mathcal{S}$ se décompose en trois rotations successives: une première d'angle ϕ autour de l'axe $\vec{Z}$, une deuxième d'angle θ autour du nouvel axe $\vec{Y}'$, et une troisième d'angle ψ autour de $\vec{Z}''$ (cf. fig. 2.6).

La figure 2.6 suggère qu'initialement, on a $\phi_0 = \theta_0 = \psi_0 = 0$, ce qui ne sera presque jamais le cas. En effet, dans cette thèse, l'axe $\vec{Z}$ du laboratoire sera toujours aligné avec une grandeur physique, qui sera par exemple le vecteur de Bloch dans le cas des équations de Bloch. Cette figure permet d'illustrer la construction des angles d'Euler, mais ne dit absolument rien sur la dynamique du système. Par exemple, dans le cas d'un solide en rotation libre, l'axe $\vec{Z}$ du repère $\mathcal{L}$ est par convention aligné sur le moment cinétique du solide, et les trois axes de $\mathcal{S}$ correspondent aux axes d'inertie principaux de ce dernier. Si à $t = 0$, les deux repères sont confondus, alors l'un des axes d'inertie sera confondu avec

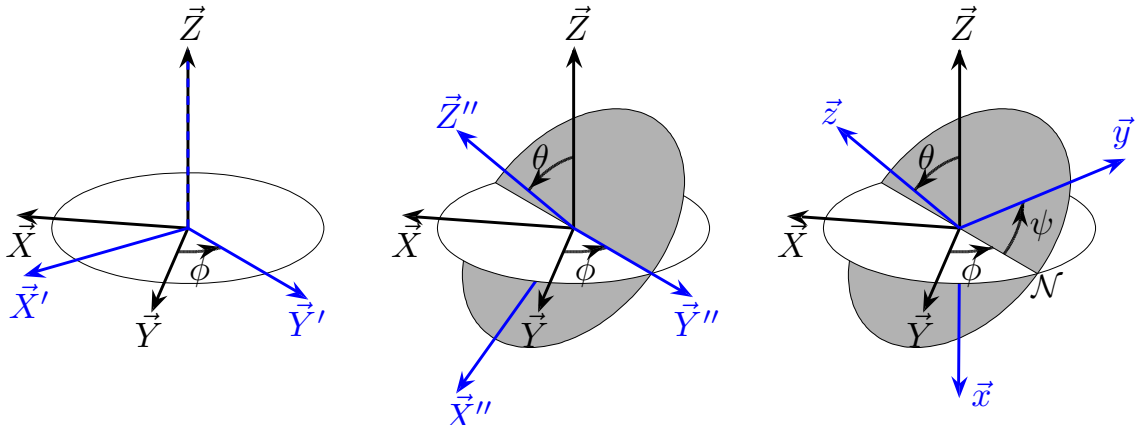

FIGURE 2.6 – Construction des angles d'Euler. En partant du repère $\mathcal{L}$ (en noir), on retrouve le repère $\mathcal{S}$ (bleu) en faisant une rotation de ϕ autour de $\vec{Z}$, une de θ autour de $\vec{Y}'$, puis une de ψ autour de $\vec{Z}''$. $\mathcal{N}$ est la ligne des nœuds, qui correspond à l'intersection entre les plans $(\vec{X}, \vec{Y})$ et $(\vec{x}, \vec{y})$.

le moment cinétique du solide, et par conséquent il tournera uniquement autour de cet axe, ce qui est un cas particulier.

Pour connaître la dynamique de chaque angle d'Euler, nous utilisons ici une méthode présentée dans [93]. Cette méthode consiste dans un premier temps à décomposer $\dot{\phi}$, $\dot{\theta}$ et $\dot{\psi}$ dans le repère $\mathcal{S}$ attaché au solide. On déduit de la figure 2.6 que $\dot{\phi}$ est le long de $\vec{Z}$, $\dot{\theta}$ le long de la ligne des nœuds et $\dot{\psi}$ le long de $\vec{z}$. Sur chacun des axes du solide, cela donne:

$$\begin{array}{lll} \dot{\phi}|_x = -\dot{\phi}\sin\theta\cos\psi & \dot{\theta}|_x = \dot{\theta}\sin\psi & \dot{\psi}|_x = 0 \\ \dot{\phi}|_y = \dot{\phi}\sin\theta\sin\psi & \dot{\theta}|_y = \dot{\theta}\cos\psi & \dot{\psi}|_y = 0 \\ \dot{\phi}|_z = \dot{\phi}\cos\theta & \dot{\theta}|_z = 0 & \dot{\psi}|_z = \dot{\psi}, \end{array} \tag{2.75}$$

où $\dot{\alpha}|_u$ est le projeté de $\dot{\alpha}$ sur l'axe $\vec{u}$. Les composantes du vecteur $\vec{\Omega}$ dans le repère $\mathcal{S}$ s'expriment sous la forme:

$$\Omega_x = \dot{\phi}|_x + \dot{\theta}|_x + \dot{\psi}|_x, \quad \Omega_y = \dot{\phi}|_y + \dot{\theta}|_y + \dot{\psi}|_y, \quad \Omega_z = \dot{\phi}|_z + \dot{\theta}|_z + \dot{\psi}|_z. \tag{2.76}$$

Après quelques manipulations simples, on obtient finalement le système différentiel suivant:

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \Omega_x \sin\psi + \Omega_y \cos\psi \\ \dot{\phi} &= \Omega_y \frac{\sin\psi}{\sin\theta} - \Omega_x \frac{\cos\psi}{\sin\theta} \\ \dot{\psi} &= \Omega_z - \Omega_y \frac{\sin\psi}{\tan\theta} + \Omega_x \frac{\cos\psi}{\tan\theta}. \end{aligned} \tag{2.77}$$

Ces équations sont donc un autre moyen d'intégrer un système sur $SO(3)$. On verra que dans le cas de l'équation de Bloch, on a en général $\vec{\Omega} = (\Omega_x, \Omega_y, \Delta)$, où Δ est une constante qui représente l'écart à la résonance. Dans ce cadre, nous verrons que θ et ψ permettent de repérer le vecteur de Bloch et que ϕ est la phase du système, dont nous devons tenir compte pour réaliser des portes quantiques.

2.6.3 Matrices de rotation

Les matrices de rotations permettent d'exprimer les coordonnées de chaque axe d'un repère par rapport à l'autre en fonction des angles d'Euler. En d'autre termes, elles représentent le passage des coordonnées d'Euler aux coordonnées cartésiennes. Il existe trois matrices de rotations, qui correspondent à des rotations autour des axes x, y et z d'un repère cartésien. Elles s'écrivent sous la forme:

$$R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}, \quad R_y = \begin{pmatrix} \cos\alpha & 0 & \sin\alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\alpha & 0 & \cos\alpha \end{pmatrix}, \quad R_z = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.78)$$

Dans notre cas, nous avons vu que nous avons construit les angles d'Euler selon la convention ZYZ. Par conséquent, les composantes de $\mathcal{S}$ s'expriment dans la base $\mathcal{L}$ par:

$$\begin{pmatrix} \vec{x}|_X & \vec{y}|_X & \vec{z}|_X \\ \vec{x}|_Y & \vec{y}|_Y & \vec{z}|_Y \\ \vec{x}|_Z & \vec{y}|_Z & \vec{z}|_Z \end{pmatrix} = R_z(\phi)R_y(\theta)R_z(\psi) = R, \quad (2.79)$$

et les composantes de $\mathcal{L}$ dans le repère $\mathcal{S}$ sont données par la matrice $G = {}^tR$ [94].

2.6.4 La toupie d'Euler

Dans ce manuscrit, nous serons souvent confronté à la dynamique d'un solide en rotation libre, aussi appelé toupie d'Euler. Un solide est caractérisé par son tenseur d'inertie, une matrice 3×3 symétrique qui représente la répartition de la matière en son sein. Le tenseur d'inertie caractérise la géométrie du solide si celui-ci est homogène. Il est toujours possible de choisir un repère dans lequel le tenseur d'inertie est diagonal. Les trois axes de ce repère sont appelés les *axes principaux d'inertie* et les trois composantes diagonales du tenseur d'inertie sont appelées *moments d'inertie principaux*. Supposons que ce repère soit le repère $\mathcal{S} = (\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ de la figure 2.6. Les moments d'inertie principaux associés à chacun de ces axes sont I_x, I_y et I_z. Lorsque le solide est en rotation libre, sa vitesse angulaire est représentée par un vecteur $\vec{\Omega}$ et son moment cinétique $\vec{L}$ est conservé. Les composantes de $\vec{L}$ dans le repère $\mathcal{S}$ sont reliées aux moments d'inertie principaux et aux composantes du vecteur vitesse angulaire $\vec{\Omega}$ du solide suivant les relations [93]:

$$\Omega_x = \frac{L_x}{I_x}, \quad \Omega_y = \frac{L_y}{I_y}, \quad \Omega_z = \frac{L_z}{I_z}. \quad (2.80)$$

Le moment cinétique $\vec{L}$ est fixe dans le laboratoire. Pour cette raison, dans tous les livres de référence [75, 93, 94], l'axe $\vec{Z}$ du repère fixe attaché au laboratoire est par convention choisit le long du vecteur $\vec{L}$. Nous avons vu que la dynamique d'un axe fixe dans le référentiel du solide est gouvernée par l'équation (2.74). En appliquant cette équation pour $\vec{L}$, puis en exprimant les composantes de $\vec{\Omega}$ en fonction de celles de $\vec{L}$, on obtient les

équations d'Euler:

$$\begin{cases} \dot{L}_x = L_y L_z \left(\frac{1}{I_z} - \frac{1}{I_y}\right), \\ \dot{L}_y = L_x L_z \left(\frac{1}{I_x} - \frac{1}{I_z}\right), \\ \dot{L}_z = L_x L_y \left(\frac{1}{I_y} - \frac{1}{I_x}\right). \end{cases} \tag{2.81}$$

Ce système comporte deux constantes du mouvement. La première est l'énergie de la toupie donnée par $\frac{1}{2}\vec{L}\cdot\vec{\Omega}$. La deuxième est la norme de son moment cinétique $|\vec{L}|$. En notant E l'énergie et ℓ la norme du moment cinétique, on a explicitement:

$$\ell^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, \quad 2E = \frac{L_x^2}{I_x} + \frac{L_y^2}{I_y} + \frac{L_z^2}{I_z}. \tag{2.82}$$

Ces deux expressions sont les équations paramétriques de deux surfaces dans l'espace $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$. La première est l'équation d'une sphère de rayon ℓ. Elle traduit le fait que dans le repère $\mathcal{S} = (\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$, le moment cinétique $\vec{L}(t)$ vit une sphère de rayon ℓ. La deuxième est l'équation paramétrique d'un ellipsoïde de rayons $\sqrt{2I_x E}$, $\sqrt{2I_y E}$ et $\sqrt{2I_z E}$. Pour ℓ et E fixés, la solution $\vec{L}(t)$ des équations d'Euler appartient à l'intersection des surfaces d'énergie et de moments cinétiques constants. Un exemple de solution est représenté sur la figure 2.7. On réalise le portrait de phase des équations d'Euler en traçant sur la

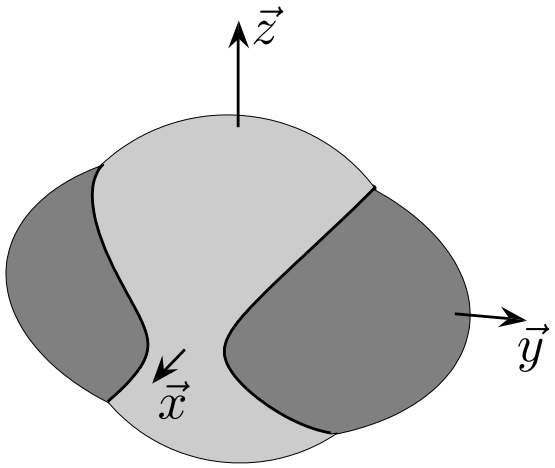

FIGURE 2.7 – Sphère de moment cinétique constant (en gris clair) et ellipsoide d'énergie constante (gris foncé) dans le repère $\mathcal{S}$. La solution $\vec{L}(t)$ des équations d'Euler appartient à l'intersection de ces deux surfaces (ligne noire épaisse). Pour cette représentation, nous avons pris la convention $I_z < I_x < I_y$, ce qui détermine les valeurs relatives des rayons de l'ellipsoïde. Nous avons ici $r_z < r_x < r_y$, avec $r_i = \sqrt{2I_i E}$ le rayon de l'ellipsoide le long de l'axe $i = \{x, y, z\}$.

sphère les solutions $\vec{L}(t)$ correspondantes à plusieurs valeurs de l'énergie E. Notons que dans plusieurs livres de références (par exemple [93]), le portrait de phase est représenté sur l'ellipsoïde, ce qui revient à fixer l'énergie et à tracer les solutions $\vec{L}(t)$ pour plusieurs valeurs de ℓ. Les deux représentations sont parfaitement équivalentes. Le portrait de phase des équations d'Euler est représenté sur la figure 2.8. Cette figure montre trois familles

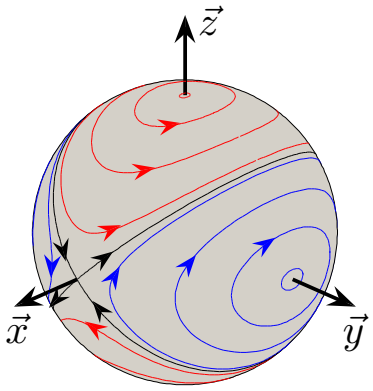

FIGURE 2.8 – Portrait de phase des équations d'Euler. Chaque trajectoire correspond à une solution $\vec{L}(t)$ dans le repère $\mathcal{S}$. Nous avons gardé la convention $I_z < I_x < I_y$.

de solutions. Les trajectoires rouges, qu'on appellera *solutions oscillantes*, apparaissent lorsque le rayon de la sphère est inférieur au rayon intermédiaire de l'ellipsoïde, c'est-à-dire lorsque $\ell < \sqrt{2I_x E}$. On appellera les trajectoires bleues *solutions tournantes*. Celles-ci apparaissent lorsque $\ell > \sqrt{2I_x E}$. Ces deux familles sont séparées par les trajectoires en noir, appelées *séparatrices*, qui correspondent au cas particulier où $\ell = 2I_x E$. On remarque qu'il y a des points d'équilibre stable le long de $\vec{y}$ et $\vec{z}$, et instable le long de $\vec{x}$. Cela signifie que lorsque le solide tourne autour de son axe d'inertie $\vec{y}$ ou $\vec{z}$, la rotation est stable, dans le sens où une petite déviation de la trajectoire ne modifie pas beaucoup la dynamique. En revanche, la rotation est instable si le solide tourne autour de son axe d'inertie $\vec{x}$. Une petite déviation peut entraîner le solide vers un état complètement différent. Ces points d'équilibre instable sont toujours le long de l'axe d'inertie intermédiaire, c'est-à-dire l'axe principal d'inertie le long duquel la valeur du moment d'inertie est comprise entre les deux autres. Notons que les trajectoires de ce portrait de phase sont toutes périodiques, excepté les séparatrices, qui relient les points d'équilibre instable. Les solutions oscillantes et tournantes sont données par des *fonctions elliptiques de Jacobi* [95]. Les séparatrices sont données par des fonctions hyperboliques.

Cette analyse ne donne que la dynamique de $\vec{L}$ dans le repère du solide, mais ne donne pas la dynamique relative des repères $\mathcal{S}$ et $\mathcal{L}$. Celle-ci nécessite de supposer que $\vec{L}$ est par convention le long de l'axe $\vec{Z}$ du laboratoire, et d'introduire les trois angles d'Euler afin de tenir compte des axes $\vec{X}$ et $\vec{Y}$. Nous n'allons pas le faire dans cette introduction. Il faut savoir que les angles d'Euler peuvent être choisis de différentes manières. Pour que le choix soit pertinent, c'est-à-dire pour que la dynamique de chaque angle puisse être interprétée de façon intuitive, il est nécessaire de tenir compte des valeurs relatives des moments d'inerties principaux I_x, I_y et I_z.

Chapitre 3

Contrôle optimal géométrique sur une chaîne de spins couplés

3.1 Introduction

Les portes quantiques, ou transformations unitaires, sont utilisées en RMN pour manipuler des ensembles de spins [20] ou pour implémenter des portes quantiques qui sont des briques élémentaires pour les ordinateurs quantiques [96]. Pour que les transformations soient unitaires, il est nécessaire que le transfert soit rapide pour éviter les phénomènes de relaxation. Le contrôle en temps optimal est donc tout à fait adapté à ce genre de problème. Des méthodes de contrôle géométrique ont déjà permis de traiter efficacement des modèles simples comme le contrôle en temps optimal d'un spin 1/2 sur le groupe unitaire SU(2) [97], de deux [72, 98] et trois spins couplés [99]. Dans ce chapitre, nous allons utiliser le principe du maximum de Pontryagin pour contrôler une chaîne de trois spins couplés selon le modèle d'Ising. Nous traitons le cas où les couplages inter-spin sont inégaux. Cela permet de compléter une étude réalisée en 2008 sur le même sujet [100], en proposant une analyse hamiltonienne du problème. Le modèle ayant déjà été mis en œuvre [101, 102, 103], ce travail a pour but de calculer explicitement les solutions du problème et les champs de contrôle pour certains transferts. Nous verrons que la condition de maximisation du pseudo-Hamiltonien donne un Hamiltonien de Pontryagin qui est celui d'une toupie d'Euler, ce qui permet d'intégrer complètement les équations du mouvement du système et d'en déduire une description géométrique des solutions. Ce travail a donné lieu à la publication [104]. Il a été réalisé en collaboration avec le groupe de S. J. Glaser à Munich.

Dans ce chapitre, nous allons utiliser le formalisme de la matrice densité que nous allons exprimer dans une certaine base qui se construit à partir des matrices de Pauli. Pour un système à deux niveaux, les matrices de Pauli sont de la forme:

$$\sigma_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{3.1}$$

La matrice densité peut s'exprimer en fonction des coordonnées du vecteur de Bloch suivant la formule:

$$\rho = \tfrac{1}{2}\,\mathbb{1} + c_x\sigma_x + c_y\sigma_y + c_z\sigma_z, \tag{3.2}$$

où c_x, c_y et c_z sont les composantes du vecteur de Bloch et $\mathbb{1}$ la matrice identité. On remarque que les coordonnées de Bloch sont directement données par la valeur moyenne des opérateurs σ_α, puisque l'on a:

$$\langle\sigma_x\rangle \equiv \mathrm{Tr}(\sigma_x\rho) = c_x, \tag{3.3}$$

et il en va de même pour c_y et c_z. On peut facilement généraliser cette démarche pour des systèmes plus complexes. Pour deux spins couplés, les transformations unitaires appartiennent au groupe $SU(4)$. On introduit les matrices suivantes:

$$\sigma_{1\alpha} = \sigma_\alpha \otimes \mathbb{1}, \quad \sigma_{2\alpha} = \mathbb{1} \otimes \sigma_\alpha, \quad \sigma_{10} = \sigma_{20} = \tfrac{1}{2}\,\mathbb{1}\otimes\mathbb{1} = \tfrac{1}{2}\,\mathbb{1}_{4\times 4}\,. \tag{3.4}$$

où $\alpha = \{x, y, z\}$, $\mathbb{1}$ est la matrice identité de dimension 2×2 et $\otimes$ est le produit de Kronecker. La relation entre la matrice densité et les matrices de base devient [100]:

$$\rho = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta} c_{\alpha\beta}\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}, \quad c_{00} = 1, \tag{3.5}$$

avec $(\alpha, \beta) = \{0, x, y, z\}$. Cette décomposition de la matrice densité va nous être utile pour traiter le cas de trois spins couplés. Remarquons que pour un seul spin, la matrice densité s'exprime en fonction de quatre matrices de bases qui sont les trois matrices de Pauli et la matrice identité. Pour deux spins, elle se décompose en fonction de 16 matrices de dimensions 4×4, matrice identité comprise. D'une manière générale, les transformations unitaires sur une chaîne de N spins couplés appartiennent au groupe $SU(2^N)$. La matrice densité est alors de dimension $2^N \times 2^N$ et s'exprime en fonction de $2^N \times 2^N$ matrices de base. La matrice densité d'une chaîne de trois spins peut être décomposé de la même manière que l'équation (3.5). Elle s'exprime alors en fonction de 64 matrices et 64 coefficients $c_{\alpha\beta\gamma}$. Le coefficient c_{000} étant égal à 1, elle ne se compose en réalité que de 63 coefficients. Nous allons expliciter cet aspect dans la prochaine section.

Ce chapitre est organisé de la façon suivante. Dans la section 3.2, on décrit le modèle et on montre que la dimension du problème peut être considérablement réduite. On applique ensuite le principe du maximum de Pontryagin dans la section 3.3, puis on en déduit une famille particulière de contrôles qui sont donnés par des fonctions elliptiques de Jacobi. Dans la section 3.4, on intègre les trajectoires afin d'en déduire les paramètres des champs de contrôle qui nous intéressent. Ceux-ci sont explicités dans la section 3.5. On montre ensuite qu'on retrouve naturellement le cas particulier où les couplages sont égaux dans la section 3.6. Nous proposons une méthode pour aborder le problème du contrôle optimal d'une chaîne de quatre spins dans la section 3.7. On conclut cette étude dans la section 3.8. Nous allons voir que ce chapitre nécessite de nombreux calculs qui sont difficiles. Pour cette raison, nous avons reporté toutes les démonstrations importantes dans la section 3.9

3.2 Modèle

On considère une chaîne de trois spins 1/2 numérotés de 1 à 3 dont les constantes de couplages J_{12} et J_{23} sont différentes. On se propose de contrôler l'état de la chaîne en contrôlant le spin 2 (cf. fig 3.1). Il est possible de ne contrôler que la dynamique du spin 2

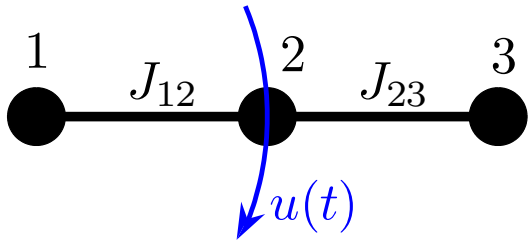

FIGURE 3.1 – Modèle considéré dans ce chapitre. Le champ de contrôle $u(t)$ est envoyé sur le spin 2 dans le but de contrôler l'état de la chaîne. Les paramètres J_{12} et J_{23} sont des constantes de couplage.

si les noyaux de trois atomes voisins d'une même molécule n'ont pas la même fréquence de Larmor. En appliquant un champ de contrôle résonant uniquement avec le spin 2, le champ n'affecte que ce spin. Les constantes de couplage vont permettre de modifier l'état des deux autres. De cette manière, les spins 1 et 3 sont contrôlés indirectement. Prenons un exemple concret. La molécule 2-^{13}C-2-fluoromalonate de diéthyle est structurée de telle sorte qu'elle contient au centre un ensemble de trois atomes: un carbone 13, un fluor 19 et un hydrogène couplés les uns aux autres. Cette molécule est représentée sur la figure 3.2.

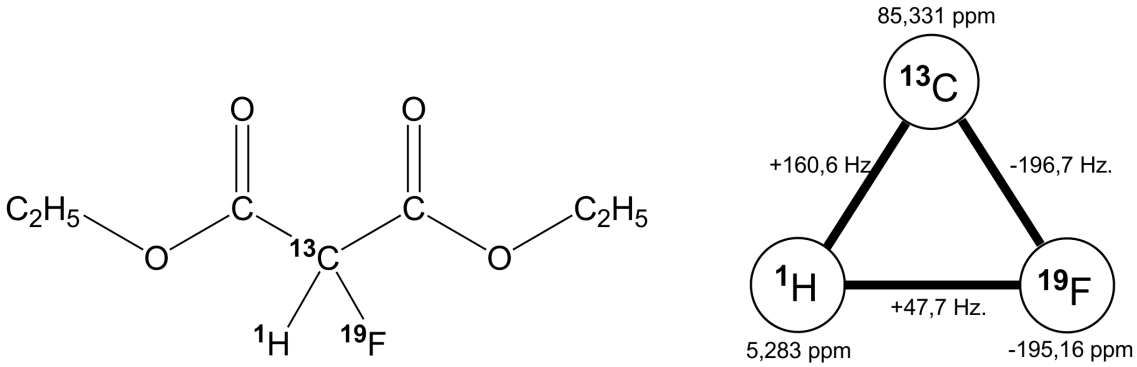

FIGURE 3.2 – *A gauche:* Molécule 2-^{13}C-2-fluoromalonate de diéthyle. *A droite:* Partie de la molécule utilisable pour le contrôle d'une chaîne de spins couplés.

On voit sur cette figure que la constante de couplage entre les atomes ^{1}H et ^{19}F est beaucoup plus petite que les deux autres. On peut donc la négliger. La chaîne $^1H - ^{13}C - ^{19}F$ constitue alors une chaîne de trois spins inégalement couplés. En notant 1 le spin de l'hydrogène, 2 celui du carbone et 3 celui du fluor, la chaîne est telle que $J_{12} = 160.6$ Hz et $J_{23} = -196.7$ Hz, soit un ratio $k = J_{23}/J_{12} = -1.22$.

La fréquence de résonance de chaque spin se calcule à partir du déplacement chimique donné en partie par million (ppm). Celui-ci est calculé suivant la formule $\delta(ppm) = \frac{\omega - \gamma B_0}{\gamma B_0}$, où γ est le rapport gyromagnétique du noyau en question et B_0 la valeur du champ émis par le spectromètre en Tesla. Par exemple, un spectromètre 600 MHz émet un champ magnétique de 14.09 T. Les valeurs des rapports gyromagnétiques sont de 42.576 MHz/T pour l'hydrogène, 10.705 MHz/T pour le carbone et 40.53 MHz/T pour le fluor.

Les valeurs des fréquences de résonance de chaque spin sont alors données par:

$$\omega_1 = 600,003 \text{ MHz}, \quad \omega_2 = 150.873 \text{ MHz}, \quad \omega_3 = 564.333 \text{ MHz}. \tag{3.6}$$

On rappelle qu'en RMN on considère un repère tournant dans lequel on applique des impulsions radiofréquences pour contrôler l'état du système. On se place dans un repère tournant à la fréquence ω_2. Pour évaluer quels spins sont directement affectés par les champs de contrôle, on peut écrire les équations de Bloch pour chaque spin sans tenir compte des termes de couplage ni de la relaxation. On applique un champ de contrôle $u(t)$ dans la direction $\vec{y}$ du repère tournant. Les équations de Bloch s'écrivent alors:

$$\dot{\vec{M}}_k = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_k & -u(t) \\ -\Delta_k & 0 & 0 \\ u(t) & 0 & 0 \end{pmatrix} \vec{M}_k, \tag{3.7}$$

avec $\Delta_k = \omega_k - \omega_2$ et $k = \{1, 2, 3\}$. On a donc $\Delta_1 = 449.13$ MHz, $\Delta_2 = 0$ et $\Delta_3 = 35.67$ MHz. En appliquant une impulsion $u(t)$ de l'ordre du KHz, seul le spin 2 est affecté car la dynamique des deux autres est complètement dominée par le terme d'offset. Ainsi, les spins 1 et 3 ont une dynamique qui n'est due qu'à des termes de couplage qui ne sont pas pris en compte dans les équations (3.7).

Revenons au modèle théorique. L'espace de Hilbert est de dimension $2^{N_s} = 8$, soit une matrice densité composée de 63 éléments indépendants. On définit les matrices 8×8 suivantes:

$$I_{1\alpha} = \sigma_\alpha \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}, \quad I_{2\alpha} = \mathbb{1} \otimes \sigma_\alpha \otimes \mathbb{1}, \quad I_{3\alpha} = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma_\alpha, \quad I_{k0} = \tfrac{1}{2}\, \mathbb{1}_{8\times 8} \tag{3.8}$$

avec $\alpha = \{0, x, y, z\}$. La matrice densité du système se décompose sous la forme:

$$\rho = \frac{1}{4} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} c_{\alpha\beta\gamma} I_{1\alpha} I_{2\beta} I_{3\gamma}, \quad c_{000} = 1. \tag{3.9}$$

Elle dépend donc de 64 coordonnées $c_{\alpha\beta\gamma}$. Plus exactement, le fait que la matrice densité soit de trace 1 implique qu'elle n'est composée que de 63 coordonnées indépendantes (condition $c_{000} = 1$). L'opérateur Hamiltonien du système est donné en fonction de ces matrices par:

$$H = 2\pi J_{12} I_{1z} I_{2z} + 2\pi J_{23} I_{2z} I_{3z} + \pi u(t) I_{2y}. \tag{3.10}$$

Les paramètres J_{12} et J_{23} sont les constantes de couplage entre les spins 1-2 et 2-3 respectivement et $u(t)$ est le champ de contrôle appliqué sur le spin 2 dans la direction y.

Khaneja et al. ont montré dans [105] que ce modèle est suffisant pour calculer des contrôles capables de réaliser une CNOT(1,3). Une CNOT(1,3) est une porte NOT à trois qubits qui utilise le qubit 1 comme qubit de contrôle, laisse le qubit 2 inchangé et modifie l'état du qubit 3 en fonction de celui du qubit de contrôle.

Dans notre modèle, nous ne considérons qu'un seul contrôle. Cela est a priori plus difficile qu'avec deux champs et implique un temps de contrôle plus long. Cependant, les analyses numériques faites dans [106] suggèrent que le temps de contrôle n'est pas affecté pour le transfert particulier que nous allons étudier, à savoir:

$$I_{1x} \to 4I_{1y}I_{2y}I_{3z}, \tag{3.11}$$

qui est habituellement utilisé en RMN à haute résolution [107]. La complexité du système peut être considérablement réduite. Tout d'abord, nous avions remarqué en introduction que la matrice densité peut être reconstruite avec la donnée des valeurs moyennes des opérateurs de spins à l'aide des relations $\langle I_{1\alpha}I_{2\beta}I_{3\gamma}\rangle = c_{\alpha\beta\gamma}/4$. Rappelons que cette valeur moyenne est par définition donnée par la formule $\langle O\rangle = \mathrm{Tr}(O\rho)$, ce qui permet de calculer le système différentiel qui gouverne l'évolution de ces valeurs moyennes grâce à l'équation de Liouville-von Neumann:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H,\rho]. \tag{3.12}$$

Par exemple, on calcule la dérivée temporelle de $\langle I_{1x}\rangle$ à partir de la formule suivante:

$$\frac{d}{dt}\langle I_{1x}\rangle = -i\,\mathrm{Tr}(I_{1x}[H,\rho]) = -i\,\mathrm{Tr}(I_{1x}[H,\rho]) = -J_{12}\pi\,\mathrm{Tr}(2I_{2y}I_{2z}) = -J_{12}\pi\langle 2I_{1y}I_{2z}\rangle. \tag{3.13}$$

Cette démarche permet de montrer que les états I_{1x} et $4I_{1y}I_{2y}I_{3z}$ qui nous intéressent appartiennent à un même sous espace composé de seulement quatre coordonnées qui sont:

$$x_1 = \langle I_{1x}\rangle, \quad x_2 = \langle 2_{1y}I_{2z}\rangle, \quad x_3 = \langle 2I_{1y}I_{2x}\rangle, \quad x_4 = \langle 4I_{1y}I_{2y}I_{3z}\rangle. \tag{3.14}$$

En posant $\vec{X} = {}^t(x_1,x_2,x_3,x_4)$, le système différentiel correspondant est:

$$\frac{d}{dt}\vec{X}(t) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -u(t) & 0 \\ 0 & u(t) & 0 & -k \\ 0 & 0 & k & 0 \end{pmatrix}\vec{X}(t), \tag{3.15}$$

avec $k = J_{23}/J_{12}$. On impose $k > 1$ sans perte de généralité. Pour simplifier la description du système, le temps a été normalisé par un facteur $J_{12}\pi$. La deuxième étape consiste à réduire encore la dimension du système en faisant le changement de coordonnées suivant:

$$x_1 = r_1, \quad x_2 = r_2\sin\alpha, \quad x_3 = r_2\cos\alpha, \quad x_4 = r_3, \tag{3.16}$$

avec $\alpha(t)$ un angle contrôlé par $u(t)$. Une fois que les fonctions $\alpha(t)$ et $\vec{r}(t)$ sont connues, on en déduit les coordonnées $x_i(t)$ et donc le champ de contrôle $u(t)$. Celui-ci vérifie la relation suivante:

$$u = \frac{x_1x_3 - kx_2x_4}{x_2^2 + x_3^2} - \frac{d\alpha}{dt}. \tag{3.17}$$

La section 3.5 est consacrée au calcul du champ $u(t)$. En posant $u_s = \sin\alpha$, $u_c = \cos\alpha$ et $\vec{r} = {}^t(r_1, r_2, r_3)$, le système différentiel s'écrit:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \begin{pmatrix} 0 & -u_s & 0 \\ u_s & 0 & -ku_c \\ 0 & ku_c & 0 \end{pmatrix} \vec{r}, \tag{3.18}$$

avec la contrainte $u_s^2 + u_c^2 = 1$. Ce système différentiel correspond à celui d'un corps solide effectuant des mouvements de rotation, comme nous l'avons introduit dans la section 2.6 du chapitre 2. La dynamique de ces rotations n'est pas définie, elle est gouvernée par les contrôles u_s et u_c. Les trajectoires solutions de cette équation vivent sur une sphère. Le transfert $I_{1x} \to 4I_{1y}I_{2y}I_{3z}$ considéré se traduit dans ces coordonnées par: $\vec{r}_0 = (1,0,0) \to \vec{r}_f = (0,0,1)$. Le problème est donc de déterminer des contrôles u_s et u_c qui réalisent ce transfert en temps optimal en tenant compte de la contrainte $u_s^2 + u_c^2 = 1$. Dans la suite, nous utiliserons le PMP sur ce système pour calculer la forme générale de ce type de contrôle, puis nous intégrerons les trajectoires sur la sphère.

3.3 Calcul des contrôles optimaux

3.3.1 Application du Principe du Maximum de Pontryagin

Le PMP va nous servir à calculer une forme générale des contrôles u_s et u_c. On introduit le pseudo-Hamiltonien du système:

$$\tilde{H}_p = \vec{p} \cdot \dot{\vec{r}} + p^0, \tag{3.19}$$

avec $\vec{p}$ le vecteur adjoint et p^0 une constante négative (cf. section 2.3 du chapitre 2). On peut s'affranchir du terme p^0 en posant $H_p = \tilde{H}_p - p^0$. On introduit le moment cinétique classique $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, ce qui nous permet d'écrire le pseudo-Hamiltonien sous la forme:

$$H_p = ku_cL_1 + u_sL_3. \tag{3.20}$$

On rappelle que selon le PMP, une condition nécessaire pour que les contrôles soient optimaux est qu'ils maximisent ce pseudo-Hamiltonien. Cette condition de maximisation s'écrit:

$$H = \max_{us^2+uc^2=1} H_p, \tag{3.21}$$

où H est le Hamiltonien de Pontryagin. Les champs de contrôle satisfaisant cette condition sont de la forme:

$$u_c = \frac{kL_1}{\sqrt{k^2L_1^2 + L_3^2}}, \quad u_s = \frac{L_3}{\sqrt{k^2L_1^2 + L_3^2}}. \tag{3.22}$$

Le Hamiltonien de Pontryagin correspondant est $H = \sqrt{k^2L_1^2 + L_3^2}$. Comme H ne dépend pas explicitement du temps, il constitue une constante du mouvement du système. On peut montrer que la norme du moment cinétique est aussi une constante du mouvement, c'est-à-dire que $L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = \ell^2 = cst$. Cela conduit au fait que le système Hamiltonien est Liouville intégrable [75]. On pourra poser $H = 1$ sans perte de généralité [4].

3.3.2 Dynamique optimale

En se servant des équations de Hamilton $\dot{x}_i = \partial H/\partial p_i$ et $\dot{p}_i = -\partial H/\partial x_i$, on peut montrer que les trois vecteurs $\vec{r}$, $\vec{p}$ et $\vec{L}$ satisfont le même système différentiel donné par:

$$\dot{\vec{X}} = \begin{pmatrix} 0 & -L_3 & 0 \\ L_3 & 0 & -k^2 L_1 \\ 0 & k^2 L_1 & 0 \end{pmatrix} \vec{X}, \tag{3.23}$$

avec $\vec{X} = \vec{r}$, $\vec{p}$ ou $\vec{L}$. En comparant l'équation (3.23) avec les concepts introduits dans la section 2.6 du chapitre 2, on remarque que ce système correspond à la rotation libre d'un solide à trois dimensions dont les moments d'inertie principaux sont tels que $I_1 = 1/k^2$, $I_2 \to +\infty$ et $I_3 = 1$. La dynamique du système est illustrée sur la figure 3.3. On

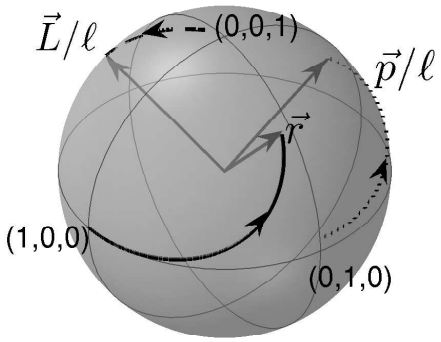

FIGURE 3.3 – Illustration du mouvement du repère $(\vec{r}, \vec{p}/\ell, \vec{L}/\ell)$ dans le repère $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$. Le trait plein représente le mouvement de $\vec{r}$, le trait en pointillés fins le mouvement de $\vec{p}/\ell$ et celui en pointillés longs celui de $\vec{L}/\ell$.

remarque que le paramètre $k = J_{23}/J_{12}$ a pour effet de modifier la forme de cette toupie, ce qui a des conséquences sur sa dynamique que nous verrons dans la suite. Dans ce système, le repère $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ dans lequel sont exprimées les coordonnées de nos vecteurs est attaché à cette toupie asymétrique particulière et le repère du laboratoire est donné par $(\vec{r}, \vec{p}/\ell, \vec{L}/\ell)$. Les champs $u_c = kL_1$ et $u_s = L_3$ impliquent des rotations autour des axes $\vec{e}_1$ et $\vec{e}_3$ respectivement. Notons que les champs de contrôle sont attachés au repère de la toupie. Pour une vraie toupie classique, nous aurions tendance à étudier le mouvement de $(\vec{e}_1(t), \vec{e}_2(t), \vec{e}_3(t))$ dans un repère fixe $(\vec{r}, \vec{p}/\ell, \vec{L}/\ell)$. Dans notre cas, l'état du système étant donné par $\vec{r}$, nous ferons l'inverse, c'est-à-dire que nous nous placerons en tant qu'observateur sur la toupie et nous regarderons la dynamique du "repère du laboratoire" $(\vec{r}(t), \vec{p}(t)/\ell, \vec{L}(t)/\ell)$. Dans toute la suite, nous noterons $\mathcal{E} = (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ le repère attaché à la toupie et $\mathcal{L} = (\vec{r}, \vec{p}/\ell, \vec{L}/\ell)$ le "repère du laboratoire".

On commence par étudier la dynamique du moment cinétique classique $\vec{L}$. L'équation (3.23) appliquée à $\vec{X} = \vec{L}$ conduit aux équations d'Euler suivantes:

$$\dot{L}_1 = -L_2 L_3, \quad \dot{L}_2 = -(k^2 - 1) L_1 L_3, \quad \dot{L}_3 = k^2 L_1 L_2. \tag{3.24}$$

Ce système comporte deux constantes du mouvement correspondant à la conservation du moment cinétique et à la conservation de l'énergie, qui s'expriment en fonction des composantes de $\vec{L}$ suivant les relations:

$$S_1 : \ k^2 L_1^2 + L_3^2 = 1, \quad S_2 : \ L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = \ell^2. \tag{3.25}$$

Dans l'espace $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$, S_1 correspond à l'équation d'un cylindre elliptique, dont le rayon le long de $\vec{e}_1$ est égal à $1/k$ et celui le long de $\vec{e}_3$ égal à 1. La surface S_2 correspond à une sphère de rayon ℓ. La solution de l'équation (3.24) appartient à l'intersection de ces deux surfaces. La valeur de ℓ permet de modifier le rayon de la sphère. Il existe donc une solution pour chaque valeur de ℓ, ce qui est illustré sur la figure 3.4. On rappelle que l'on a imposé $k > 1$.

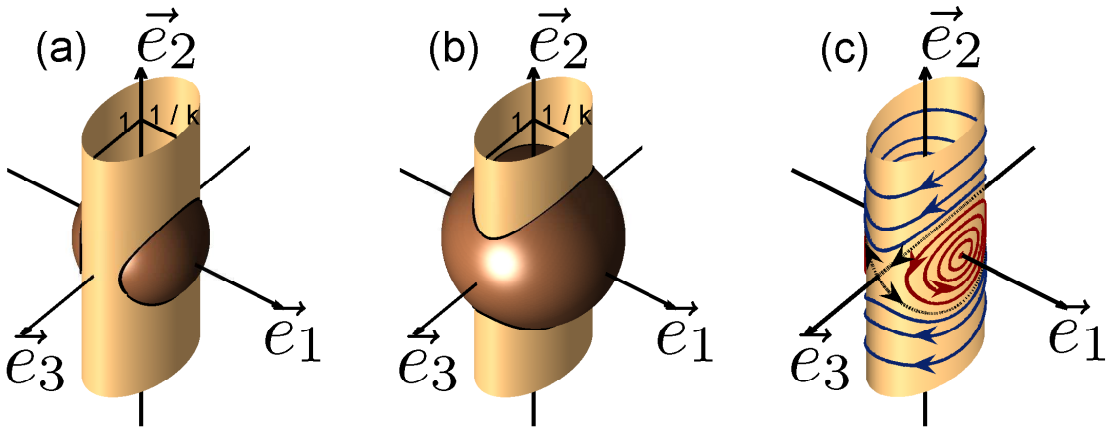

FIGURE 3.4 – Surface S_1 (en beige) et S_2 (en marron) dans le repère $\mathcal{S}$. Chaque trajectoire est une solution $\vec{L}(t)$ de (3.24) associée à une valeur du rayon de la sphère ℓ. Sur le schéma de gauche, le rayon de la sphère est tel que $1/k < \ell < 1$ et la solution associée est dite oscillante. Au milieu, on a $\ell > 1$, ce qui correspond à une solution tournante. Le schéma de droite représente des solutions associées à différentes valeurs de ℓ. Les solutions bleues sont tournantes, les rouges sont oscillantes et les courbes noires sont les séparatrices.

Cette analyse permet de distinguer trois familles de solutions. Dans le cas où le rayon de la sphère est supérieur au grand rayon du cylindre ($\ell > 1$), on obtient des trajectoires dites *tournantes*. Si le rayon de la sphère est tel que $1/k < \ell < 1$, les solutions sont de types *oscillantes*. Le cas particulier $\ell = 1$ correspond à la séparatrice.

On reconnaît sur l'image (c) de la figure 3.4 le portrait de phase d'un pendule projeté sur le cylindre elliptique. Le point d'équilibre sur l'axe $\vec{e}_1$ est analogue à un pendule au repos. Les solutions en rouge correspondent à un pendule oscillant et celles en bleu à un pendule tournant. Dans le cas de la séparatrice les trajectoires ne sont pas périodiques. On peut voir qu'en partant d'un point quelconque de la séparatrice, le système évolue vers un point d'équilibre instable et ne revient jamais à son état initial. Ce comportement est celui d'un pendule avec une vitesse initiale très précise induisant un mouvement vers le haut,

de façon à ce qu'il ne redescende jamais. Cette remarque va nous permettre d'intégrer le système en intégrant l'équation d'un pendule.

3.3.3 Expression des contrôles

Pour éviter de présenter trop de calculs, nous donnerons uniquement l'expression analytique des solutions tournantes car cette famille de solutions permet de réaliser le transfert $\vec{r}_0 = {}^t(1,0,0) \to \vec{r} = {}^t(0,0,1)$.

Proposition 3.3.1 *Pour $k \geq 1$ et pour une solution tournante partant de $\vec{r}(0) = (1,0,0)$, le contrôle $\alpha(t)$ est donné par:*

$$\alpha(t) = -\operatorname{am}(\omega t + \rho, m), \tag{3.26}$$

avec $\omega = \sqrt{k^2\ell^2 - 1}$ et $m = \frac{k^2-1}{\omega^2}$. La fonction am *désigne l'amplitude de Jacobi et ρ une phase donnée par:*

$$\rho = -\operatorname{K}(m), \tag{3.27}$$

où $\operatorname{K}(m)$ *est une intégrale elliptique complète de première espèce (cf. Annexe A).*

Les contrôles u_s et u_c sont donnés par les fonctions elliptiques de Jacobi sn et cn car par définition $\sin(\mathrm{am}) = \mathrm{sn}$ et $\cos(\mathrm{am}) = \mathrm{cn}$. On a donc:

$$u_c = \cos\alpha = \operatorname{cn}(\omega t + \rho, m), \quad u_s = \sin\alpha = -\operatorname{sn}(\omega t + \rho, m). \tag{3.28}$$

On rappelle que les composantes du vecteur $\vec{L}$ sont reliées aux champs de contrôle par $u_c = kL_1$ et $u_s = L_3$. L'expression de L_2 peut se calculer à l'aide de l'équation (3.24) et des dérivées des fonctions elliptiques données en annexe A. On obtient:

$$L_1 = \frac{1}{k}\operatorname{cn}(\omega t + \rho, m), \quad L_2 = -\frac{\omega}{k}\operatorname{dn}(\omega t + \rho, m), \quad L_3 = -\operatorname{sn}(\omega t + \rho, m). \tag{3.29}$$

La forme (3.26) ou (3.28) constitue une famille de contrôles qui réalisent des transferts solutions du système (3.23), partant du point initial $\vec{r}_0 = {}^t(1,0,0)$ et en temps minimum. Ces solutions dépendent de deux paramètres, à savoir ℓ et le temps optimal t_f (les autres étant fixés par k et ℓ). Le travail consiste maintenant à déterminer le contrôle particulier associé à la trajectoire qui atteint l'état cible $\vec{r}_f = {}^t(0,0,1)$, c'est-à-dire de calculer les valeurs des paramètres adaptées à ce transfert. Dans la suite, nous expliciterons la forme générale des solutions $\vec{r}(t)$ sous l'influence d'un contrôle de la forme (3.26). Puis, nous adapterons nos paramètres au transfert souhaité.

3.4 Intégration des trajectoires

3.4.1 Angles d'Euler

Le système étant équivalent à une toupie asymétrique attachée au repère $\mathcal{E}$ qui tourne dans le repère du laboratoire $\mathcal{L}$, il est naturel d'introduire les angles d'Euler qui permettent de décrire la position d'un repère par rapport à un autre. On rappelle que l'on

est intéressé par $\vec{r}(t)$, qui correspond à un des axes du repère du laboratoire. Par conséquent, nous choisissons une représentation des angles d'Euler comme sur la figure 3.5, qui sous-entend que le repère $\mathcal{E}$ est fixe. Faire l'inverse serait parfaitement équivalent, mais cette représentation permet d'avoir plus d'intuition sur la dynamique du vecteur $\vec{r}$.

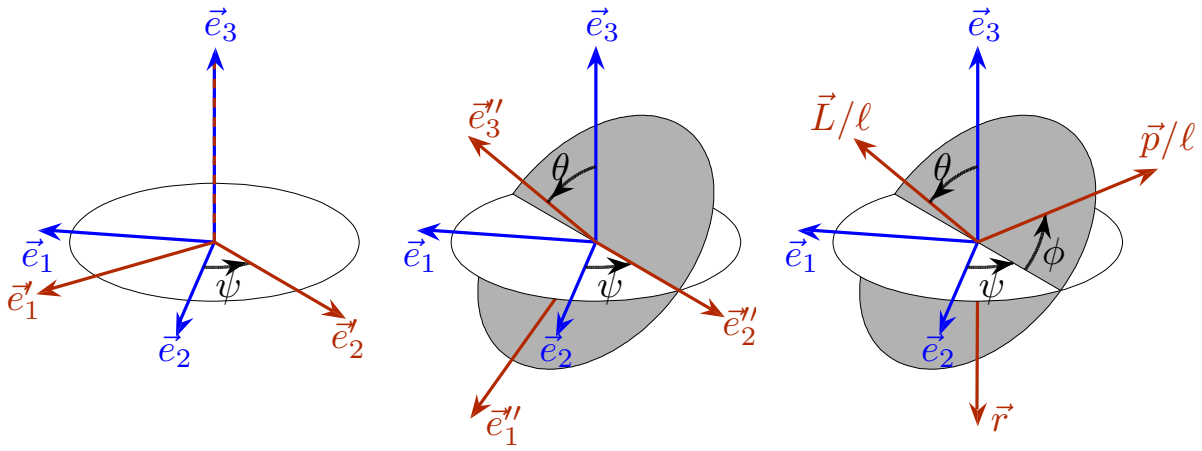

FIGURE 3.5 – Construction des angles d'Euler. En partant du repère $\mathcal{E}$ (en bleu), on retrouve le repère $\mathcal{L}$ (en rouge) en faisant une rotation de ψ autour de $\vec{e}_3$, une de θ autour de $\vec{e}'_2$, puis une de ϕ autour de $\vec{e}''_3$.

Les coordonnées de chaque vecteur $\vec{r}$, $\vec{p}$ et $\vec{L}$ peuvent être exprimées en fonction des angles d'Euler à l'aide des matrices de rotations. Comme ces vecteurs correspondent aux trois axes du repère $\mathcal{L}$, ils sont donnés directement par la matrice de rotation. Cette matrice de rotation se décompose en trois rotations successives qui sont: une rotation d'angle ψ autour de $\vec{e}_3$, une autre d'angle θ autour de $\vec{e}'_2$ et une dernière d'angle ϕ autour de $\vec{e}''_3$. Ceci est illustré sur la figure 3.5. La base $\mathcal{L}$ s'exprime donc dans la base $\mathcal{E}$ sous la forme:

$$\mathcal{L}(t) = R_3(\psi)R_2(\theta)R_3(\phi) = (\vec{r}, \vec{p}/\ell, \vec{L}/\ell), \tag{3.30}$$

avec:

$$R_2(\zeta) = \begin{pmatrix} \cos\zeta & 0 & \sin\zeta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\zeta & 0 & \cos\zeta \end{pmatrix}, \quad R_3(\zeta) = \begin{pmatrix} \cos\zeta & -\sin\zeta & 0 \\ \sin\zeta & \cos\zeta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{3.31}$$

Les coordonnées du vecteur $\vec{r}(t)$ qui nous intéressent constituent donc la première colonne de cette matrice de rotation. Elles sont explicitement données par:

$$\begin{cases} r_1 = \cos\theta\cos\psi\cos\phi - \sin\psi\sin\phi \\ r_2 = \cos\theta\sin\psi\cos\phi + \cos\psi\sin\phi \\ r_3 = -\sin\theta\cos\phi. \end{cases} \tag{3.32}$$

On peut voir immédiatement sur la figure 3.5, ou le calculer en se servant de la matrice de rotation, que les composantes du moment cinétique $\vec{L}$ sont données par:

$$L_1 = \ell\sin\theta\cos\psi, \quad L_2 = \ell\sin\theta\sin\psi, \quad L_3 = \ell\cos\theta. \tag{3.33}$$

On rappelle que pour des trajectoires partant de $\vec{r}(0) = {}^t(1,0,0)$, la phase du champ de contrôle est donnée par $\rho = -\mathrm{K}(m)$. A l'aide des équations (3.29) et des propriétés des fonctions de Jacobi, on peut calculer la valeur des autres composantes de $\vec{L}(0)$. On peut ainsi en déduire la valeur des deux angles d'Euler θ et ψ grâce aux équations (3.33). Les valeurs des différentes variables à l'instant $t = 0$ sont données dans le tableau 3.1 L'angle $\phi(0)$ est déterminé en substituant $\psi(0)$ et $\theta(0)$ dans (3.32), de manière à ce que

$\alpha(0)$	$L_1(0)$	$L_2(0)$	$L_3(0)$	$\psi(0)$	$\theta(0)$	$\phi(0)$
$-\frac{\pi}{2}$	0	$-\sqrt{\ell^2-1}$	1	$-\frac{\pi}{2}$	$\arctan(\sqrt{\ell^2-1})$	$\frac{\pi}{2}$

TABLE 3.1 – Valeur des différentes variables à l'instant $t = 0$.

la condition initiale $\vec{r}(0) = {}^t(1,0,0)$ soit satisfaite.

Comme la dynamique de $\vec{L}$ est donnée par les fonctions elliptiques de Jacobi suivant l'équation (3.29), on connaît les fonctions $\theta(t)$ et $\psi(t)$, qui s'expriment, après quelques manipulations, sous la forme:

$$\psi(t) = \arctan\left(\frac{L_2(t)}{L_1(t)}\right), \quad \theta(t) = \arctan\left(\sqrt{\frac{L_1^2(t)+L_2^2(t)}{L_3^2(t)}}\right). \tag{3.34}$$

L'angle $\phi(t)$ est plus difficile à déterminer. Nous donnons ci-dessous son expression. La démonstration est donnée dans la section 3.9.

Proposition 3.4.1 *La dynamique de l'angle ϕ est donnée par:*

$$\phi(t) = \ell t + \frac{\ell^2-1}{\omega\ell}\left[\Pi\left(\alpha(t), \tfrac{1}{\ell^2}, m\right) - \Pi\left(\tfrac{1}{\ell^2}, m\right)\right] + \frac{\pi}{2}, \tag{3.35}$$

où $\alpha(t) = \mathrm{am}(\omega t + \rho, m)$ est le contrôle, $\Pi\left(\alpha(t), \frac{1}{\ell^2}, m\right)$ et $\Pi\left(\frac{1}{\ell^2}, m\right)$ sont des intégrales elliptiques complètes et incomplètes de troisième espèce, respectivement (cf.annexe A).

Connaissant la dynamique des angles ψ, θ et ϕ, on en déduit la dynamique des trajectoires $\vec{r}(t)$ partant de $\vec{r}(0) = {}^t(1,0,0)$ conduites par le contrôle $\alpha(t)$ sur la sphère. Il nous reste donc à calculer la bonne valeur du paramètre ℓ pour atteindre l'état cible $\vec{r}_f = {}^t(0,0,1)$ ainsi que le temps optimal t_f correspondant.

3.4.2 Solution du problème

La relation $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ implique qu'à l'instant $t = t_f$ on ait $L_3(t_f) = 0$. On rappelle que $L_3 = -\mathrm{sn}(\omega t + \rho)$, avec $\rho = -\mathrm{K}(m)$. En utilisant les propriétés des fonctions elliptiques de Jacobi, on en déduit que le temps optimal pour réaliser le transfert est donné par:

$$t_f = \frac{\mathrm{K}(m)}{\omega}. \tag{3.36}$$

En substituant t_f et ρ dans le système (3.29), on calcule la valeur finale des différentes variables. Les résultats sont donnés dans le tableau 3.2. Les angles d'Euler $\theta(t_f)$ et $\psi(t_f)$

$\alpha(t_f)$	$L_1(t_f)$	$L_2(t_f)$	$L_3(t_f)$	$\psi(t_f)$	$\theta(t_f)$	$\phi(t_f)$
0	$\frac{1}{k}$	$-\frac{\omega}{k}$	0	$-\arctan(\omega)$	$\frac{\pi}{2}$	π

TABLE 3.2 – Valeur des différentes variables à l'instant t_f.

s'expriment en remplaçant $L_1(t_f)$, $L_2(t_f)$ et $L_3(t_f)$ dans (3.34). L'angle $\phi(t_f)$ se déduit ensuite des équations (3.32) grâce à la condition finale $r_1(t_f) = 0$, $r_2(t_f) = 0$ et $r_3(t_f) = 1$. Le paramètre ℓ se calcule en résolvant l'équation $\phi(t_f) = \pi$. Notons qu'à l'instant t_f, on a $\alpha(t_f) = -\,\mathrm{am}(0) = 0$. Pour que le transfert soit réalisé, il faut donc calculer la valeur de ℓ qui satisfait l'équation:

$$\frac{\ell}{\omega}\,\mathrm{K}(m) - \frac{\ell^2 - 1}{\omega\ell}\Pi\left(\tfrac{1}{\ell^2}, m\right) - \frac{\pi}{2} = 0. \tag{3.37}$$

Cette équation étant très compliquée à résoudre analytiquement, nous calculerons la valeur de ℓ solution de cette équation numériquement. La figure 3.6 montre l'évolution du temps optimal t_f en fonction de k, ainsi que des trajectoires $\vec{r}(t)$ associées à plusieurs valeurs de k.

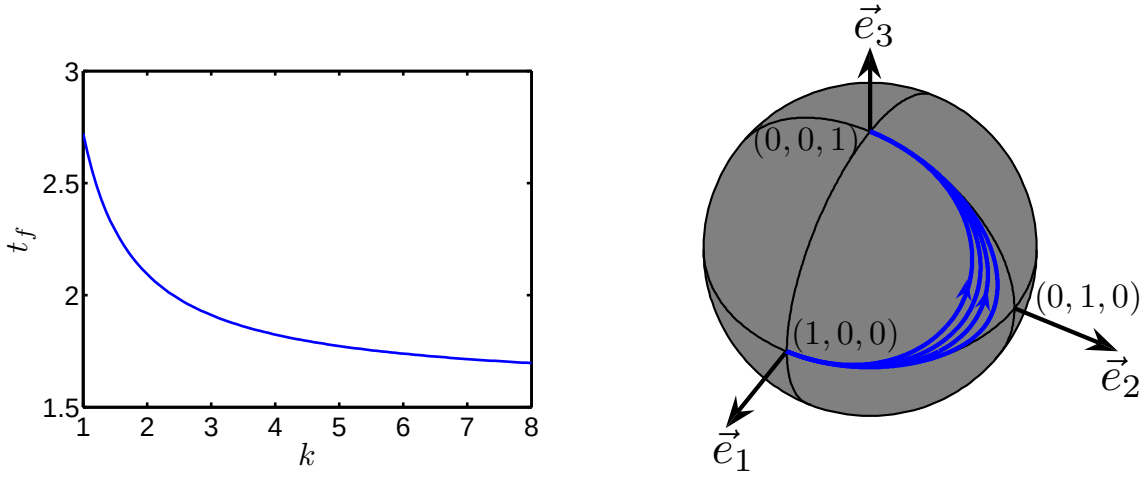

FIGURE 3.6 – *A gauche:* Temps optimal du transfert $\vec{r}(0) = (1, 0, 0) \to \vec{r}(t_f) = (0, 0, 1)$ en fonction de k. *A droite:* trajectoire $\vec{r}(t)$ sur la sphère pour plusieurs valeurs de k. De la courbe la plus interne à la plus externe, on a: $k = 1$, $k = 2.5$, $k = 4$ et $k = 8$.

3.5 Champ de contrôle $u(t)$

On peut maintenant exprimer le contrôle $u(t)$ du système initial (3.15) ainsi que l'évolution des variables $\langle I_{1x}\rangle$, $\langle 2I_{1y}I_{2z}\rangle$, $\langle 2I_{1y}I_{2x}\rangle$ et $\langle 4I_{1y}I_{2y}I_{3z}\rangle$ en fonction du temps.

Proposition 3.5.1 *Le contrôle $u(t)$ qui réalise le transfert $\langle I_{1x}\rangle \to \langle 4I_{1y}I_{2y}I_{3z}\rangle$ est donné en fonction des paramètres du problème par:*

$$u(t) = 2\omega\,\mathrm{dn}(\omega t + \rho, m), \tag{3.38}$$

avec $\omega = \sqrt{k^2\ell^2 - 1}$, $m = \frac{k^2-1}{k^2\ell^2-1}$, $\rho = -\,\mathrm{K}(m)$ *et* $\omega t_f = \mathrm{K}(m)$.

La figure 3.7 montre le champ de contrôle $u(t)$ pour plusieurs valeurs de k. On peut voir

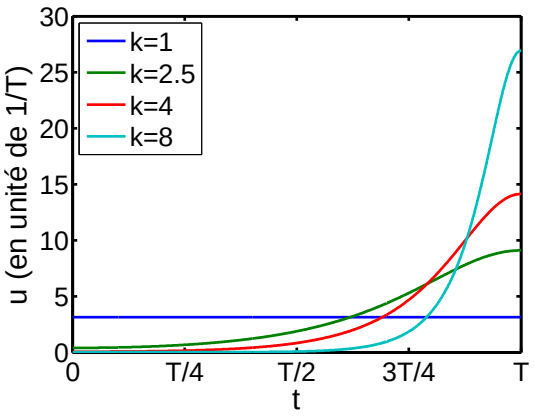

FIGURE 3.7 – Champ de contrôle $u(t)$ donné par la formule (3.38) en fonction du temps pour différentes valeurs de k. T est le temps final qui est différent pour chaque pulse.

sur cette figure que pour des couplages égaux, i.e. $k = 1$, le contrôle $u(t)$ est un simple π-pulse constant. L'aire de chacun de ces pulses est donnée par:

$$A = \int_0^{t_f} 2\omega\,\mathrm{dn}(\omega t + \rho, m)dt = \int_{-\,\mathrm{K}(m)}^{0} 2\,\mathrm{dn}(u, m)du = \pi. \tag{3.39}$$

Il est intéressant de noter que ce transfert est réalisé en un temps optimal par un π-pulse d'amplitude constante si les couplages sont égaux et modulé par la fonction dn sinon.

3.6 Cas des couplages égaux

Le cas d'une chaîne de trois spins également couplés s'obtient en substituant $k = 1$ dans les solutions que nous avons calculé. Le paramètre m des fonctions elliptiques de Jacobi se simplifie en $m = 0$. On a de plus $\omega = \sqrt{\ell^2 - 1}$. Les fonctions elliptiques deviennent des fonctions trigonométriques simples, i.e. sn $\to$ sin, cn $\to$ cos et dn $\to 1$. De plus, pour des solutions partant de $\vec{r}(0) = {}^t(1, 0, 0)$, on a $\rho = -\,\mathrm{K}(m = 0) = -\pi/2$ et le contrôle $\alpha(t)$ se simplifie en $\alpha(t) = \pi/2 - \omega t$. On peut montrer en s'aidant de l'annexe A que l'angle $\phi(t)$ est donné par la formule:

$$\phi(t) = \ell t + \arctan\left(\frac{\omega}{\ell}\tan\alpha\right). \tag{3.40}$$

Pour un transfert allant sur l'état $\vec{r}(t_f) = {}^t(0, 0, 1)$, on a simplement $t_f = \mathrm{K}(0)/\omega = \pi/(2\omega)$. De plus, on a toujours $\alpha(t_f) = 0$ et $\phi(t_f) = \pi$. Le paramètre ℓ se calcule avec l'équation (3.37), qui se simplifie:

$$\pi = \frac{\ell\pi}{2\omega} \Rightarrow \ell = \frac{2}{\sqrt{3}}. \tag{3.41}$$

On a donc $t_f = \pi\sqrt{3}/2$ ce qui est en accord avec [108] (table 1, au facteur π près, suite à la renormalisation du temps).

3.7 Extension pour une chaîne de quatre spins

Dans cette section, nous allons voir jusqu'à quel point cette méthode peut se généraliser pour le contrôle d'une chaîne de quatre spins couplés par trois constantes de couplage qui sont J_{12}, J_{23} et J_{34}. On prend un modèle simple où l'on applique seulement deux champs dans la direction y, un sur le spin 2 et un sur le spin 3. L'opérateur Hamiltonien du système s'écrit $H = H_\ell + H_c$, avec

$$\begin{aligned} H_\ell &= 2\pi J_{12} I_{1z} I_{2z} + 2\pi J_{23} I_{2z} I_{3z} + 2\pi J_{34} I_{3z} I_{4z}, \\ H_c &= \pi u(t) I_{2y} + \pi v(t) I_{3y}, \end{aligned} \tag{3.42}$$

où les matrices $I_{n\alpha}$ sont les opérateurs de spin de dimension 16×16. On se concentre sur un sous-système de six coordonnées qui sont:

$$\begin{aligned} &x_1 = \langle I_{1x} \rangle, && x_2 = \langle 2I_{2y} I_{2z} \rangle, && x_3 = \langle 2I_{2y} I_{2z} \rangle, \\ &x_4 = \langle 4I_{2y} I_{2y} I_{3z} \rangle, && x_5 = \langle 4I_{2y} I_{2y} I_{3x} \rangle, && x_6 = \langle 8I_{2y} I_{2y} I_{3y} I_{4x} \rangle. \end{aligned} \tag{3.43}$$

En reprenant la même démarche que pour le cas des trois spins, on peut montrer que la dynamique du vecteur $\vec{X} = {}^t(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$ est donnée par:

$$\frac{d}{dt}\vec{X} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & -k_{23} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_{23} & 0 & -v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v & 0 & -k_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & k_{34} & 0 \end{pmatrix} \vec{X}, \tag{3.44}$$

avec $k_{23} = J_{23}/J_{12}$, $k_{34} = J_{34}/J_{12}$. Le temps a été normalisé par un facteur d'échelle $J_{12}\pi$. La dimension du système peut être réduite en posant:

$$x_1 = r_1, \quad x_2 = r_2 \sin\alpha, \quad x_3 = r_2 \cos\alpha, \quad x_4 = r_3 \sin\beta, \quad x_5 = r_3 \cos\beta, \quad x_6 = r_4. \tag{3.45}$$

En introduisant les contrôles intermédiaires $u_1 = \sin\alpha$, $u_2 = \cos\alpha \sin\beta$, $u_3 = \cos\beta$, la dynamique de $\vec{r} = {}^t(r_1, r_2, r_3, r_4)$ est donnée par:

$$\frac{d}{dt}\vec{r} = \begin{pmatrix} 0 & -u_1 & 0 & 0 \\ u_1 & 0 & -k_{23}u_2 & 0 \\ 0 & k_{23}u_2 & 0 & -k_{34}u_3 \\ 0 & 0 & k_{34}u_3 & 0 \end{pmatrix} \vec{r}. \tag{3.46}$$

On remarque que la définition des contrôles u_i conduit à la relation $u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 \leq 2$. Les contrôles u_1, u_2 et u_3 ne sont pas indépendants puisqu'ils sont reliés par les angles α et β. On considère néanmoins qu'ils peuvent être choisis indépendamment afin d'appliquer directement le PMP. On introduit le tenseur moment cinétique:

$$L_{\mu\nu} = r_\mu p_\nu - p_\mu r_\nu, \tag{3.47}$$

avec $\mu, \nu \in \{1, 2, 3, 4\}$. Ce tenseur possède les propriétés suivantes:

$$L_{\mu\mu} = 0, \quad L_{\mu\nu} = -L_{\nu\mu}, \quad L^2 = L_{\mu\nu}L^{\mu\nu} = \sum_{j>i} L_{ij}^2. \tag{3.48}$$

Le pseudo-Hamiltonien du système est alors de la forme:

$$H_p = u_1 L_{12} - u_2 k_{23} L_{23} + u_3 k_{34} L_{34}. \tag{3.49}$$

On écrit la condition de maximisation du PMP comme pour le cas des trois spins, i.e.:

$$H = \max_{u_1^2+u_2^2+u_3^2=1} H_p. \tag{3.50}$$

Les champs de contrôle correspondant qui satisfont cette condition sont:

$$u_1 = \frac{L_{12}}{R}, \quad u_2 = -\frac{k_{23}L_{23}}{R}, \quad u_3 = \frac{k_{34}L_{34}}{R}, \tag{3.51}$$

avec $R = \sqrt{L_{12}^2 + k_{23}^2 L_{23}^2 + k_{34}^2 L_{34}^2}$. Le Hamiltonien de Pontryagin s'écrit:

$$H = \sqrt{L_{12}^2 + k_{23}^2 L_{23}^2 + k_{34}^2 L_{34}^2}. \tag{3.52}$$

On peut montrer, en utilisant les équations de Hamilton, que les coordonnées du tenseur L ont une dynamique de la forme:

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} L_{12} \\ L_{13} \\ L_{14} \\ L_{23} \\ L_{24} \\ L_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & k_{23}^2 L_{23} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -k_{23}^2 L_{23} & 0 & -k_{34}^2 L_{34} & -L_{12} & 0 & 0 \\ 0 & k_{34}^2 L_{34} & 0 & 0 & -L_{12} & 0 \\ 0 & L_{12} & 0 & 0 & -k_{34}^2 L_{34} & 0 \\ 0 & 0 & L_{12} & k_{34}^2 L_{34} & 0 & k_{23}^2 L_{23} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -k_{23}^2 L_{23} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{12} \\ L_{13} \\ L_{14} \\ L_{23} \\ L_{24} \\ L_{34} \end{pmatrix}. \tag{3.53}$$

Il est donc évident que la norme du moment cinétique L^2 constitue une intégrale première du système. Nous avons donc un système dont l'état $\vec{r}$ appartient à une sphère de dimension 4, soit 3 coordonnées généralisées. Dans le cas général, nous connaissons seulement deux intégrales premières, ce qui ne nous permet pas d'intégrer ce système analytiquement. Cependant, cela donne un système que nous pouvons résoudre par des méthodes numériques, comme une méthode de tir [24, 76] qui consiste à chercher la bonne condition initiale $\vec{p}_0$ pour atteindre la cible.

3.8 Conclusion

Nous avons montré que le contrôle en temps optimal d'une chaîne de trois spins inégalement couplés se résout analytiquement en remarquant que le Hamiltonien de Pontryagin est le même que le Hamiltonien d'une toupie asymétrique particulière en rotation libre. Ainsi, nous pouvons interpréter l'état, l'état adjoint et le moment cinétique classique

comme les trois axes d'un repère qui joue le rôle du repère du laboratoire dans le problème classique. Cela nous permet d'avoir une interprétation géométrique complète du système. Nos résultats comprennent le cas limite des couplages égaux qui avait été publié dans [108]. Cette méthode donne un moyen systématique d'aborder le contrôle optimal d'une chaîne de N spins en le ramenant au problème de la rotation libre d'une toupie particulière de dimension N, comme nous l'avons vu pour le cas d'une chaîne de quatre spins. Ce type de problème n'est en général pas intégrable, excepté pour certains cas particuliers comme celui de Manakov [109]. Cependant, ce cas ne s'applique pas pour la chaîne de quatre spins. En effet, la chaîne de quatre spins a une dynamique qui est celle d'une toupie asymétrique particulière, dont certains moments d'inertie principaux tendent vers $+\infty$ en raison des conditions suivantes:

$$k_{13} = k_{14} = k_{24} = 0. \tag{3.54}$$

Or, le cas de Manakov apparaît pour des constantes k_{ij} particulières qui peuvent s'écrire sous la forme:

$$k_{ij} = \frac{b_i - b_j}{a_i - a_j}. \tag{3.55}$$

On peut montrer qu'il n'est pas possible de trouver des b_i et des a_i qui satisfont (3.54). Par conséquent, il serait nécessaire de déterminer un autre cas intégrable.

3.9 Démonstration des différentes propositions

Démonstration de la proposition 3.3.1

On rappelle que les champs de contrôle du PMP sont donnés par $u_c = kL_1 = \cos\alpha$ et $u_s = L_3 = \sin\alpha$. En dérivant L_3 et en se servant des équations (3.24), on obtient $\dot{\alpha} = kL_2$. En dérivant une seconde fois, on obtient $\ddot{\alpha} = -k(k^2-1)L_1L_3$ et donc:

$$\ddot{\alpha} = -(k^2-1)\cos\alpha\sin\alpha = -\frac{k^2-1}{2}\sin(2\alpha). \tag{3.56}$$

En multipliant cette équation par $\dot{\alpha}$ et en intégrant, on arrive à:

$$[\dot{\alpha}]^2 = \frac{k^2-1}{2}\cos\alpha + C, \tag{3.57}$$

où C est une constante que l'on peut déterminer en substituant $\dot{\alpha} = kL_2$ et $\cos(2\alpha) = \cos^2\alpha - \sin^2\alpha = k^2L_1^2 - L_3^2 = 1 - 2L_3^2$ (on a utilisé la conservation de l'énergie). En développant cette expression, on obtient:

$$C = k^2L_2^2 + k^2L_3^2 - L_3^2 - \frac{k^2-1}{2}. \tag{3.58}$$

En utilisant la conservation du moment cinétique, on obtient:

$$C = k^2\ell^2 - 1 - \frac{k^2-1}{2}. \tag{3.59}$$

En substituant cette expression dans (3.57), on obtient une équation de la forme:

$$[\dot{\alpha}]^2 = -(k^2-1)\sin^2\alpha + k^2\ell^2 - 1. \tag{3.60}$$

On rappelle que pour des solutions tournantes, on a $\ell > 1$. De plus, on a fixé $k > 1$. On peut donc définir les paramètres réels suivants:

$$\omega = \sqrt{k^2\ell^2 - 1}, \quad m = \frac{k^2-1}{k^2\ell^2-1}. \tag{3.61}$$

Notons que $m \in [0,1]$. En substituant ω et m dans (3.60), et après quelques manipulations, on obtient:

$$d(\omega t) = \pm\frac{d\alpha}{\sqrt{1-m\sin^2\alpha}}. \tag{3.62}$$

En se servant de l'annexe A, on arrive finalement à:

$$\omega t = \pm\int_{\alpha_0}^{\alpha}\frac{d\alpha}{\sqrt{1-m\sin^2\alpha}} = \pm[\mathrm{F}(\alpha,m) - \mathrm{F}(\alpha_0,m)]. \tag{3.63}$$

La fonction F désigne une intégrale elliptique incomplète de première espèce. Par identification avec l'équation (A.2) de l'annexe A, on a finalement:

$$\alpha(t) = \pm\,\mathrm{am}(\omega t + \rho, m), \tag{3.64}$$

où l'on a posé $\rho = \pm\,\mathrm{F}(\alpha_0, m)$. Partant de $\vec{r}_0 = {}^t(1,0,0)$, on a automatiquement $L_1(0) = 0$, puisque par définition $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$. On a donc $\cos\alpha_0 = 0$, soit $\alpha_0 = \pm\pi/2$. On en déduit que $\rho = \pm\,\mathrm{F}(\pi/2, m) = \pm\,\mathrm{K}(m)$.

Choix des signes. Pour ne pas s'encombrer de nombreux signes, nous donnons ici un argument qui permet de faire un choix. Les champs de contrôle $u_c = \cos\alpha$ et $u_s = \sin\alpha$ sont le long de $\vec{e}_1$ et $\vec{e}_3$ respectivement. Au temps dt, le vecteur $\vec{r}(dt)$ peut s'écrire comme la succession de deux rotations, i.e.:

$$\vec{r}(dt) = \exp\left[\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -ku_c(dt)\\ 0 & ku_c(dt) & 0\end{pmatrix}dt\right]\exp\left[\begin{pmatrix}0 & -u_s(dt) & 0\\ u_s(dt) & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}dt\right]\vec{r}(0), \tag{3.65}$$

ce qui correspond à une rotation infinitésimale d'angle $u_s(dt)$ autour de $\vec{e}_3$ suivie d'une autre d'angle $u_c(dt)$ autour de $\vec{e}_1$. Suivant les signes de ρ et $\alpha(t)$, la trajectoire va évoluer dans une certaine direction sur la sphère, ce qui est représenté sur la figure 3.8. On peut montrer que:

(a)	$\rho = +\,\mathrm{K}(m)$ $\alpha = +\,\mathrm{am}$	$\Rightarrow$	$u_c(dt) < 0$ $u_s(dt) > 0$	(b)	$\rho = +\,\mathrm{K}(m)$ $\alpha = -\,\mathrm{am}$	$\Rightarrow$	$u_c(dt) < 0$ $u_s(dt) < 0$
(c)	$\rho = -\,\mathrm{K}(m)$ $\alpha = +\,\mathrm{am}$	$\Rightarrow$	$u_c(dt) > 0$ $u_s(dt) < 0$	(d)	$\rho = -\,\mathrm{K}(m)$ $\alpha = -\,\mathrm{am}$	$\Rightarrow$	$u_c(dt) > 0$ $u_s(dt) > 0$

Les cas (a) et (c) impliquent des trajectoires qui se dirigent vers le pôle sud de la sphère et ne sont donc pas adaptés pour atteindre l'état cible $\vec{r}(t_f) = (0,0,1)$. Nous choisissons le cas (d), qui donne des trajectoires se dirigeant dans le bon sens. Nous aurions aussi pu choisir le cas (b).

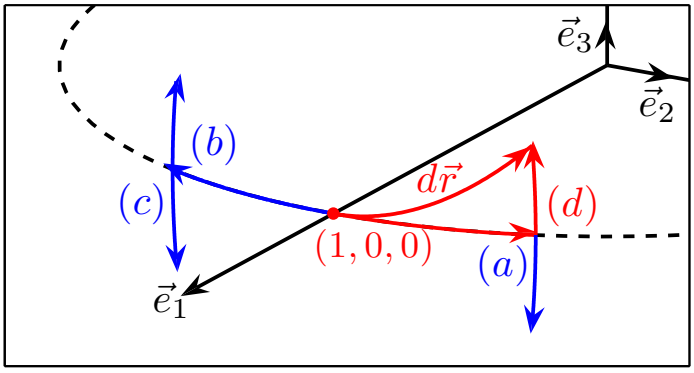

FIGURE 3.8 – Evolution de $\vec{r}$ entre les instants $t = 0$ et $t = dt$ selon les signes choisis. La ligne en pointillés représente l'équateur de la sphère.

Démonstration de la proposition 3.4.1

Pour déterminer l'angle $\phi(t)$, on commence par calculer la dynamique de ϕ en suivant la méthode expliquée dans la section 2.6 de l'introduction. On obtient la dynamique suivante:

$$\dot{\phi} = \ell k^2 \cos^2\psi = \ell k^2 \frac{L_1^2}{L_1^2 + L_2^2} = \ell k^2 \cos^2\psi = \ell k^2 \frac{L_1^2}{\ell^2 - L_3^2}. \tag{3.66}$$

De plus, en se rappelant que $kL_1 = u_c = \cos\alpha$ et $L_3 = u_s = \sin\alpha$, on peut facilement montrer que:

$$dt = \frac{-d\alpha}{\omega\sqrt{1 - m\sin^2\alpha}} \Rightarrow \frac{d\phi}{d\alpha} = \frac{-\ell\cos^2\alpha}{\omega\sqrt{1 - m\sin^2\alpha}(\ell^2 - \sin^2\alpha)}. \tag{3.67}$$

Après quelques manipulations, on obtient:

$$\frac{d\phi}{d\alpha} = \frac{-\ell}{\omega\sqrt{1 - m\sin^2\alpha}}\left[1 - \frac{\ell^2 - 1}{\ell^2\left(1 - \frac{\sin^2\alpha}{\ell^2}\right)}\right]. \tag{3.68}$$

On obtient finalement une intégrale de la forme:

$$\phi(t) - \phi(0) = -\frac{\ell}{\omega}\int_{\alpha(0)}^{\alpha(t)} \frac{d\alpha'}{\sqrt{1 - m\sin^2\alpha'}} + \frac{\ell^2 - 1}{\omega\ell}\int_{\alpha(0)}^{\alpha(t)} \frac{d\alpha'}{\left(1 - \frac{\sin^2\alpha}{\ell^2}\right)\sqrt{1 - m\sin^2\alpha'}}. \tag{3.69}$$

En s'aidant de l'annexe A, on obtient par identification:

$$\phi(t) - \phi(0) = \left[-\frac{\ell}{\omega}\mathrm{F}(\alpha, m) + \frac{\ell^2 - 1}{\omega\ell}\Pi\left(\alpha, \tfrac{1}{\ell^2}, m\right)\right]_{\alpha_0}^{\alpha(t)}. \tag{3.70}$$

Comme on a $\alpha = -\,\mathrm{am}(\omega t + \rho, m)$, l'intégrale F se simplifie en $-\omega t - \rho$. Pour un transfert partant de $\vec{r}(0) = {}^t(1,0,0)$, on a $\alpha(0) = \pi/2$ et $\phi_0 = \pi/2$. En faisant bien attention aux signes, on retrouve finalement l'équation (3.69).

Démonstration de la proposition 3.5.1

On rappelle que les coordonnées x_2 et x_3 sont données en fonction de r_2 et α par $x_2 = r_2 \sin\alpha$ et $x_3 = r_2 \cos\alpha$. On a donc $\alpha = \arctan(x_2/x_3)$. On dérive cette expression et on obtient:

$$\dot{\alpha} = \frac{\dot{x}_2 x_3 - \dot{x}_3 x_2}{x_3^2} \frac{1}{1 + \frac{x_2^2}{x_3^2}}. \tag{3.71}$$

L'équation (3.15) conduit à:

$$\dot{\alpha} = \frac{x_1 x_3 + k x_2 x_4}{x_2^2 + x_3^2} - u(t). \tag{3.72}$$

Dans les coordonnées r_i, cette équation devient:

$$\dot{\alpha} = \frac{r_1}{r_2}\cos\alpha + k\frac{r_3}{r_2}\sin\alpha - u. \tag{3.73}$$

En se rappelant que $\cos\alpha = kL_1$ et $\sin\alpha = L_3$, on remarque que:

$$\dot{\alpha} = k\frac{\vec{r}\cdot\vec{L} - r_2 L_2}{r_2} - u. \tag{3.74}$$

Comme $\vec{r}\cdot\vec{L} = 0$ et sachant que $\dot{\alpha} = kL_2$, on obtient $u(t) = -2kL_2$, c'est-à-dire la formule (3.38).

Chapitre 4

L'effet de la raquette de Tennis

4.1 Introduction

Durant cette thèse, j'ai eu l'occasion de travailler avec Pavao Mardešić, mathématicien à l'Institut de Mathématiques de Bourgogne (IMB), sur un problème de mécanique classique. Ce travail a donné lieu à la publication d'un article [110]. Il porte sur un effet appelé *effet de la raquette de tennis* [111], ou encore *effet Djanibekov*, du nom de l'astronaute russe qui l'a mis en évidence en faisant tourner un écrou en apesanteur. L'effet peut être observé avec une raquette de tennis en faisant l'expérience suivante: prenez une raquette avec une face blanche et une face rouge. Tenez la raquette horizontalement, face blanche vers le haut et face rouge vers le bas. Jetez la raquette en l'air de manière à lui faire faire un tour autour de son axe intermédiaire (axe perpendiculaire au manche et dans le plan du tamis). Après une rotation, récupérez la raquette par le manche, la face rouge sera presque toujours vers le haut. La raquette fait quasi-systématiquement un « flip » d'angle π autour du manche. Ceci est illustré sur la figure 4.1.

Le champ gravitationnel étant localement uniforme, il affecte seulement le mouvement du centre de masse de la raquette. Le problème peut donc être traité comme la rotation libre d'un solide tridimensionnel autour de son centre de masse. Bien qu'il s'agisse d'un problème de mécanique classique, ce travail est en harmonie avec le reste de la thèse car la dynamique d'un solide en rotation est, comme nous l'avons vu, comparable à celle des équations de Bloch. Plus exactement, nous verrons que la dynamique d'un solide en rotation constitue une solution particulière des équations de Bloch. Nous exploiterons cette solution pour calculer des familles de contrôles pour un système à deux niveaux dans le prochain chapitre.

L'effet de la raquette de tennis est relativement célèbre. On peut trouver sur internet plusieurs vidéos et forums à ce sujet [111]. Pourtant, cet effet n'est pas discuté dans les livres standards consacrés à la mécanique classique [75, 93, 94], mais seulement dans un article [112] qui a été repris dans le livre de R. H. Cushman et L. Bates [113]. De plus, cet article ne permet pas de bien comprendre le phénomène. Le choix des coordonnées d'Euler qui est fait dans cet article complique beaucoup la compréhension de l'effet et il

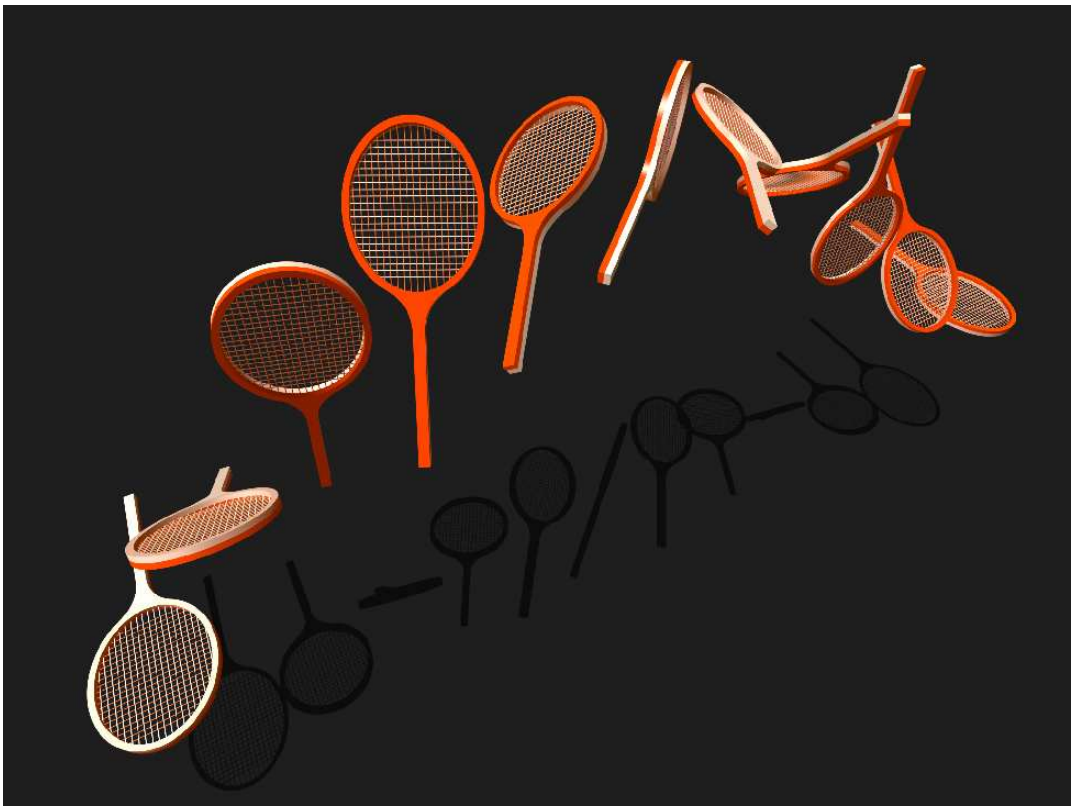

FIGURE 4.1 – Illustration de l'effet de la raquette de tennis.

est très difficilement envisageable de généraliser cette méthode sur d'autres objets qu'une raquette de tennis. En effet, l'article exploite les propriétés particulières que possède une raquette, à savoir des moments d'inertie principaux tels que $I_1 + I_2 \simeq I_3$ [112]. Ce constat nous a motivé pour reprendre le problème depuis le début sans faire aucune supposition sur les propriétés du solide. Grâce à un bon choix de coordonnées qui permet de décrire clairement la dynamique de la raquette, nous avons pu calculer une formule qui donne des conditions sur les propriétés du solide et sur les conditions initiales de la dynamique pour que l'effet de la raquette de tennis ait lieu. En d'autres termes, cette formule nous dit pour quels objets le mouvement décrit plus haut est robuste vis-à-vis des conditions initiales et permet de montrer qu'une raquette de tennis possède les propriétés nécessaires.

Dans la section 4.2, nous introduisons le modèle physique et nous donnons un jeu de coordonnées adapté à l'étude de l'effet de la raquette de tennis (noté TRE, comme "tennis racket effect"). Dans la section 4.3, nous analysons la dynamique du moment cinétique dans le repère attaché au solide en rotation, puis nous exprimons le système différentiel qui gouverne la dynamique des angles d'Euler. Dans la section 4.4, nous analysons la dynamique générale d'un corps solide quelconque dans notre système de coordonnées. Une description analytique du TRE est donnée dans la section 4.5 ainsi que la formule décrite plus haut. Nous intégrons le système numériquement afin d'analyser précisément les propriétés de robustesse du phénomène dans la section 4.6. La section 4.7 est une application des résultats sur différents solides. La conclusion et les perspectives sont données dans la

section 4.8.

Pour toutes les descriptions de ce chapitre, nous représenterons le solide par une raquette, mais tout ce que nous allons voir est valable pour n'importe quel solide rigide à trois dimensions.

4.2 Modèle et choix des angles d'Euler

Ce paragraphe a pour but de définir mathématiquement le TRE, c'est-à-dire de l'expliciter dans un certain jeu de coordonnées. On définit le repère $\mathcal{S} \equiv (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ attaché aux trois axes d'inertie principaux de la raquette (voir le chapitre 2 pour la définition des axes d'inertie principaux). L'axe $\vec{e}_1$ est le long du manche de la raquette, l'axe $\vec{e}_2$ est perpendiculaire au manche et dans le plan du tamis et l'axe $\vec{e}_3$ est perpendiculaire au plan du tamis (cf. Fig. 4.2). L'origine de ce repère est fixé au centre d'inertie de la raquette. L'expérience expliquée en introduction consiste à jeter la raquette en l'air afin de lui faire faire une rotation autour de son axe intermédiaire $\vec{e}_2$. L'appellation "axe intermédiaire" exprime le fait que le moment d'inertie principal I_2 est compris entre I_1 et I_3. Il est bien connu et facilement démontrable que des rotations autour des axes $\vec{e}_1$ et $\vec{e}_3$ sont stables alors qu'une rotation autour de $\vec{e}_2$ est instable [93]. Pour certains objets particuliers comme une raquette de tennis, l'expérience montre que lorsque le manche repéré par $\vec{e}_1$ effectue une rotation de 2π dans l'espace, la raquette a tendance à effectuer une rotation de π autour de son manche. C'est cet effet que l'on appelle *effet de la raquette de tennis*.

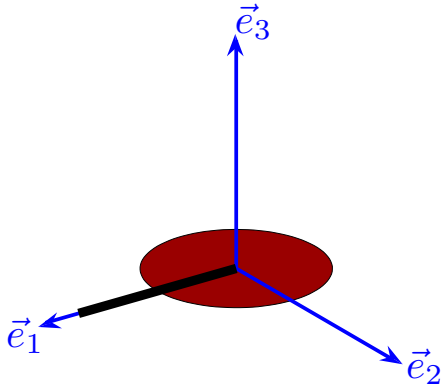

FIGURE 4.2 – Représentation du repère $\mathcal{S} \equiv (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ attaché à la raquette.

Le problème est donc de décrire le mouvement du repère $\mathcal{S}$ dans un repère statique attaché au laboratoire $\mathcal{L} \equiv (\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$ et de sorte que les origines des deux repères coïncident. Le solide étant en rotation libre, le moment cinétique $\vec{M}$ du système est conservé. Dans le cas particulier d'un solide en rotation libre, les composantes du vecteur $\vec{M}$ et celles de $\vec{\Omega}$ dans le repère $\mathcal{S}$ sont liées par les relations suivantes [75, 93, 94]:

$$M_1 = I_1\Omega_1, \quad M_2 = I_2\Omega_2, \quad M_3 = I_3\Omega_3, \tag{4.1}$$

où I_1, I_2 et I_3 sont les moments d'inertie principaux du solide. Remarquons que lorsque le solide tourne autour de son manche (repéré par $\vec{e}_1$), seule la composante Ω_1 n'est pas nulle, ce qui signifie que l'axe $\vec{e}_1$ est colinéaire à $\vec{M}$ et donc que le solide tourne uniquement autour de cet axe. Il en va de même pour les axes $\vec{e}_2$ et $\vec{e}_3$ (voir Fig. 4.3). Nous allons voir que la rotation autour de $\vec{e}_2$ est instable, ce qui signifie que si $\vec{M}$ et $\vec{e}_2$ ne sont pas exactement alignés alors l'axe de rotation du solide va complètement changer. Ce n'est pas le cas des rotations autour des axes $\vec{e}_1$ et $\vec{e}_3$ qui sont stables. C'est cette instabilité qui est à l'origine du TRE. Comme nous l'avons dit dans la partie 2.6 du

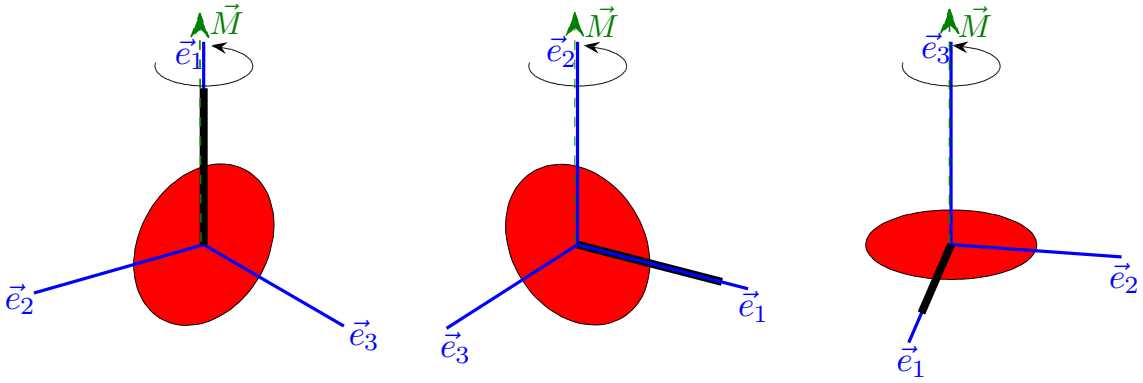

FIGURE 4.3 – Illustration des rotations autour de chaque axe de la raquette. Les rotations autour de $\vec{e}_1$ et $\vec{e}_3$ sont stables. La rotation autour de $\vec{e}_2$ est instable et l'expérience montre qu'elle aboutie souvent à un TRE.

chapitre 2, les angles d'Euler sont des coordonnées appropriées pour décrire la rotation d'un repère dans un autre. Dans un premier temps, il est nécessaire de définir le repère $\mathcal{L} \equiv (\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$ attaché au laboratoire. Un moyen naturel de le définir est d'utiliser la conservation du moment cinétique $\vec{M}$ en définissant l'un des axes du laboratoire colinéaire à ce vecteur, par convention l'axe $\vec{Z}$ [75, 93, 94]. On peut néanmoins faire la remarque suivante. Lorsque l'on jette la raquette en l'air, on essaye de lui faire faire une rotation autour de son axe $\vec{e}_2$ qui est initialement horizontal. Par conséquent, le moment angulaire $\vec{M}$ est initialement horizontal et donc horizontal pour tout t puisqu'il est conservé. Ils serait donc pédagogiquement intéressant de représenter l'axe $\vec{Z}$ horizontalement afin que le mouvement soit plus intuitif. Nous préférons cependant suivre la convention prise dans les livres [75, 93, 94] pour ne pas nuire à la compréhension du lecteur en utilisant des représentations particulières.

L'axe $\vec{Z} \equiv \vec{M}$ est décrit dans le repère du solide $\mathcal{S}$ par deux angles d'Euler que l'on note θ et ψ. Pour repérer les axes $\vec{X}$ et $\vec{Y}$, on introduit un troisième angle d'Euler que l'on note ϕ. Les deux repères et les angles d'Euler sont représentés sur la figure 4.4.

Avec ce choix de coordonnées, l'angle qui décrit la rotation du manche dans l'espace est donné par l'angle ϕ qui correspond à la précession du manche autour du moment cinétique. Le flip, qui correspond à une rotation autour du manche, est décrit par l'angle ψ. Comme nous l'avons expliqué plus haut, on jette la raquette de manière à lui faire faire un tour autour de $\vec{e}_2$ ce qui implique qu'initialement $\vec{e}_2$ est à peu près colinéaire à $\vec{M}$. En

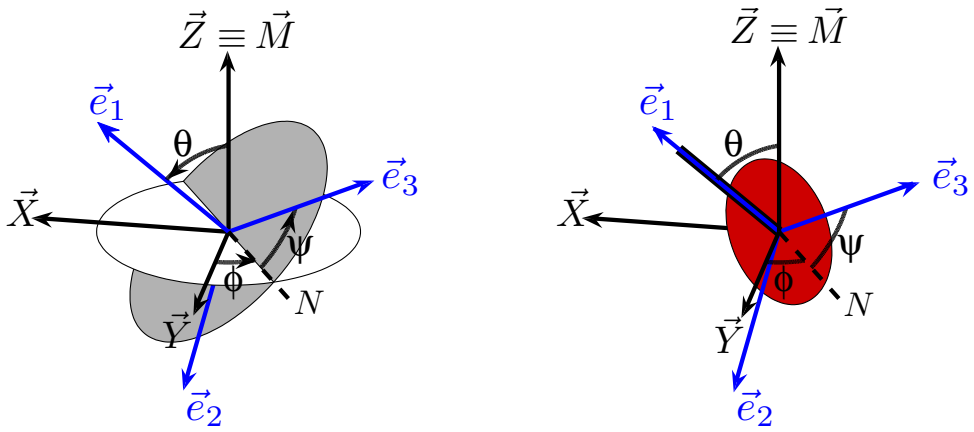

FIGURE 4.4 – *A gauche:* Représentation des angles d'Euler. L'angle ϕ décrit la précession du manche (repéré par $\vec{e}_1$) autour de l'axe $\vec{Z} \equiv \vec{M}$. Remarquons que ϕ est aussi l'angle entre $\vec{X}$ et la projection de $\vec{e}_1$ sur le plan $(\vec{X}, \vec{Y})$. L'angle ψ est l'angle qui représente le flip puisqu'il tourne autour de $\vec{e}_1$. *A droite:* Représentation des angles en incluant la raquette.

tenant compte des imperfections du lancer, cela correspond à des conditions initiales de la forme:

$$\theta_0 \simeq \frac{\pi}{2}, \quad \psi_0 \simeq 0. \tag{4.2}$$

Les axes $\vec{X}$ et $\vec{Y}$ du repère du laboratoire peuvent être définis arbitrairement. L'angle ϕ_0 est donc arbitraire. On le choisit de sorte que $\phi_0 \equiv 0$. Ainsi, dans notre jeu d'angles d'Euler, l'effet de la raquette de tennis se définit comme:

$$\Delta\phi = 2\pi \Rightarrow \Delta\psi \simeq \pi. \tag{4.3}$$

Cet effet est représenté sur la figure 4.5. Remarquez que l'on ne tient pas compte de la valeur de θ à l'instant final. Cet angle correspond au décalage du manche vers la gauche ou la droite lorsque l'on récupère la raquette. Nous verrons que la condition $\Delta\psi \simeq \pi$ implique nécessairement que $\Delta\theta \simeq 0$.

4.3 Moment cinétique

Dans cette section, nous allons dériver les équations d'Euler. Celles-ci représentent la dynamique du vecteur $\vec{M}$ dans le repère du solide. Nous avons introduit dans la section 2.6 du chapitre 2 le fait que la dynamique quelconque d'un solide en rotation autour de son centre de masse est donnée par $\dot{\vec{x}} = \vec{\Omega} \times \vec{x}$, où $\vec{x}$ est un vecteur attaché au solide. Cependant, s'agissant du mouvement d'un repère par rapport à un autre, la dynamique d'un axe du laboratoire dans le repère du solide satisfait, au signe près, la même équation, c'est-à-dire $\dot{\vec{X}} = -\vec{\Omega} \times \vec{X}$, où $\vec{X}$ est attaché au laboratoire. Cette relation s'applique donc aussi pour $\vec{M}$. En exprimant les composantes de $\vec{\Omega}$ en fonction de celles de $\vec{M}$ dans le repère $\mathcal{S}$ suivant

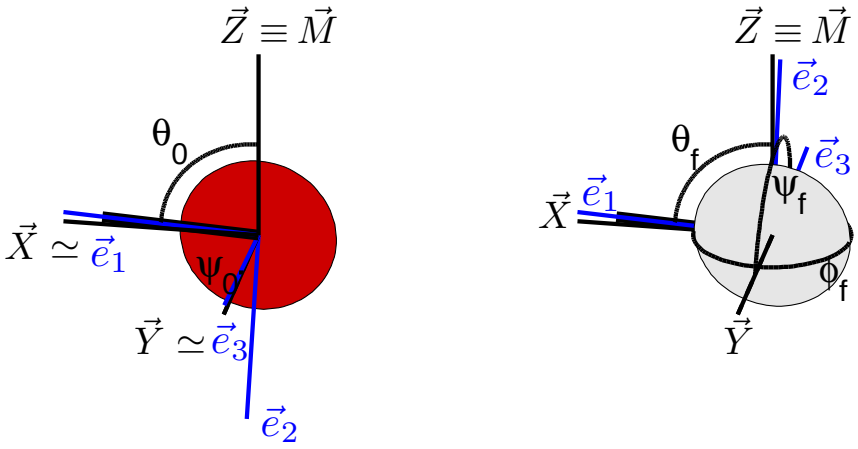

FIGURE 4.5 – Position relative des deux repères à $t = 0$ (à gauche) et à $t = t_f$ (à droite). Les conditions initiales sont telles que $\theta_0 \simeq \frac{\pi}{2}$, $\psi_0 \simeq 0$ et $\phi_0 = 0$. Lorsque le TRE a lieu, les conditions finales sont $\theta_f \simeq \theta_0$, $\psi_f \simeq \pi$ et $\phi_f = 2\pi$.

les relations (4.1), on obtient les équations d'Euler:

$$\begin{aligned} \frac{dM_1}{dt} &= -\left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_3}\right) M_2 M_3, \\ \frac{dM_2}{dt} &= \left(\frac{1}{I_1} - \frac{1}{I_3}\right) M_1 M_3, \\ \frac{dM_3}{dt} &= -\left(\frac{1}{I_1} - \frac{1}{I_2}\right) M_1 M_2. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Les solutions d'un tel système sont données par les fonctions elliptiques de Jacobi sn, cn et dn (cf. annexe A) que nous n'aurons pas besoin d'utiliser ici. Ce système admet deux intégrales premières, qui correspondent à la conservation de l'énergie et à celle du moment cinétique:

$$2E = \frac{M_1^2}{I_1} + \frac{M_2^2}{I_2} + \frac{M_3^2}{I_3}, \quad M^2 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2. \tag{4.5}$$

Dans le repère $\mathcal{S}$ attaché au solide, ces deux constantes du mouvement sont représentées par deux surfaces qui sont *l'ellipsoïde d'énergie constante* de rayon inférieur $\sqrt{2I_1E}$, intermédiaire $\sqrt{2I_2E}$, et supérieur $\sqrt{2I_3E}$, et *la sphère de moment cinétique constant* de rayon $M = |\vec{M}|$. Les solutions du système (4.4) appartiennent à l'intersection de ces deux surfaces [93]. Ceci est illustré sur la figure 4.6. Si le rayon de la sphère M est de sorte que $M \notin [2I_1E, 2I_3E]$ alors les surfaces ne s'intersectent pas et les équations d'Euler n'ont pas de solution. Les solutions oscillantes et tournantes ont lieu lorsque $2I_2E < M^2 < 2I_3E$ et $2I_1E < M^2 < 2I_2E$ respectivement. La séparatrice est donnée par $2I_2E = M^2$.

Comme nous l'avons dit plus haut, le vecteur $\vec{M}$ est décrit dans le repère $\mathcal{S}$ par les deux des angles d'Euler θ et ψ. Ses composantes sont données par:

$$M_1 = M\cos\theta, \quad M_2 = -M\sin\theta\cos\psi, \quad M_3 = M\sin\theta\sin\psi. \tag{4.6}$$

Les schémas du bas de la figure 4.6 permettent d'avoir une idée de la dynamique des angles $\theta(t)$ et $\psi(t)$. Dans le cas des solutions tournantes, on voit que l'angle ψ n'est pas borné.

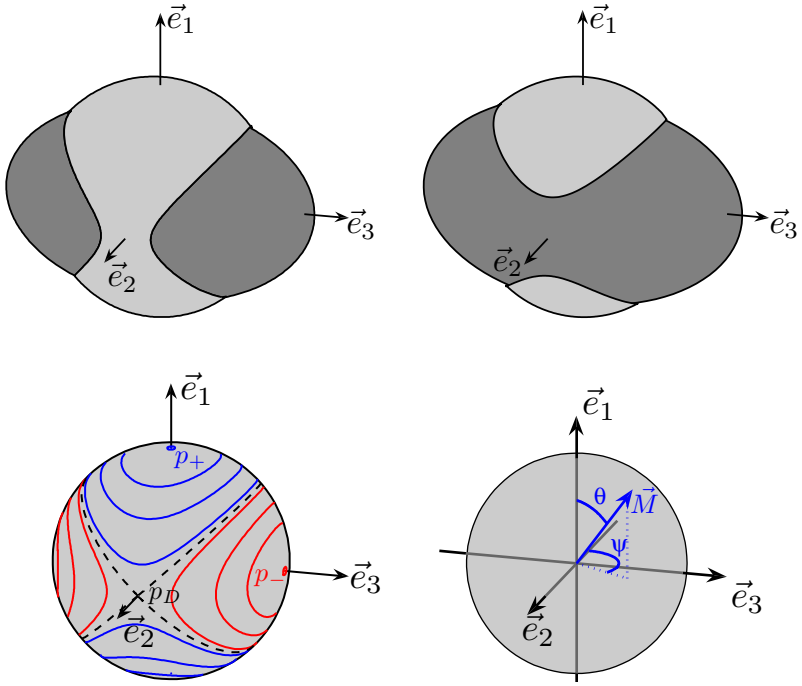

FIGURE 4.6 – *En haut:* Ellipsoïde d'énergie constante (en gris foncé) et sphère de moment cinétique constant (en gris clair) dans le cas où les trajectoires sont oscillantes, c'est-à-dire qu'elles vérifient $2I_2E < M^2 < 2I_3E$ (à gauche), et tournantes, i.e. $2I_1E < M^2 < 2I_2E$ (à droite). La solution $\vec{M}(t)$ des équations (4.4) appartient à l'intersection de ces surfaces. *En bas à gauche:* Solutions $\vec{M}(t)$ des équations (4.4) sur la sphère pour différentes valeurs de E. Les solutions tournantes sont en bleu et les solutions oscillantes en rouge. La ligne en pointillés correspond à la séparatrice, qui apparaît pour $2I_2E = M^2$. Les points p_+ et p_- sont des points d'équilibre stables et p_D est un point d'équilibre instable. *En bas à droite:* Représentation des angles θ et ψ dans le repère $\mathcal{S}$.

Il ne tourne que dans un seul sens. L'angle θ, quant-à lui, appartient à l'intervalle $[0, \pi/2]$ (ou $[\pi/2, \pi]$). On déduit de la figure 4.4 que, dans ce cas, le manche $\vec{e}_1$ de la raquette reste au dessus (resp. en dessous) du plan $(\vec{X}, \vec{Y})$, pendant que la raquette tourne autour de son manche. Pour une solution oscillante, on peut voir sur la figure 4.6 que $\psi \in [0, \pi]$ (ou $\psi \in [-\pi, 0]$) et qu'il oscille. En d'autres termes, la raquette oscille autour de son manche. Dans ce cas, on voit que θ varie sur un domaine qui comprend la valeur $\theta = \pi/2$ ce qui signifie que le manche de la raquette peut traverser le plan $(\vec{X}, \vec{Y})$. On observe aussi que les symétries des courbes impliquent que pour une variation $\Delta\psi = \pi$, on a nécessairement $\Delta\theta = 0$ comme nous l'avons dit dans la section précédente.

La figure 4.6 montre trois points d'équilibre p_+, p_- et p_D. Le point p_+ correspond au cas particulier où $\vec{M}$ est le long de $\vec{e}_1$. Nous avons expliqué plus haut que dans ces conditions la raquette ne tourne qu'autour de son manche et que cette rotation est stable. Le point p_- correspond à une rotation de la raquette autour de son axe $\vec{e}_3$ uniquement qui est aussi stable. Enfin, le point p_D correspond a une rotation de la raquette autour de

son axe intermédiaire $\vec{e}_2$, qui, comme le montre cette figure, est une situation instable.

En utilisant les symétries du problème, nous nous concentrerons sur des trajectoires telles que:

$$\begin{aligned} &\theta \in \left[0, \tfrac{\pi}{2}\right] \text{ si la trajectoire est tournante} \\ &\psi \in [0, \pi] \text{ si la trajectoire est oscillante.} \end{aligned} \tag{4.7}$$

Cela revient à ne considérer que la famille de trajectoires bleues du dessus de la sphère et la famille rouge à droite de la sphère de la figure 4.6. Ce choix simplifiera les explications.

Remarquons que le schéma en bas à droite de la figure 4.6 dépend de la forme du solide. Pour une toupie sphérique, on a $I_1 = I_2 = I_3$. L'ellipsoïde est alors une sphère et l'intersection est toute la sphère. Dans ce cas, chaque point est un point d'équilibre. Cela implique que l'axe de rotation du solide ne change pas au cours de la dynamique. Si $I_2 = I_3$, les trajectoires oscillantes n'existent pas et la séparatrice se situe dans le plan $(\vec{e}_2, \vec{e}_3)$. Les trajectoires sont alors des cercles centrés sur $\vec{e}_1$. Dans cette situation, l'angle θ est constant et l'angle ψ évolue linéairement dans le temps [93]. Si $I_1 = I_2$, les solutions tournantes n'existent pas et les solutions sont des cercles centrés sur $\vec{e}_3$, la séparatrice étant dans le plan $(\vec{e}_1, \vec{e}_2)$.

Nous avons introduit dans la section 2.6 du chapitre 2 une méthode proposée dans [93] permettant d'exprimer la dynamique de chaque angle d'Euler en fonction des composantes de $\vec{\Omega}$. En reprenant la même méthode, puis en substituant les composantes Ω_i suivant la formule (4.1) et enfin en exprimant les coordonnées M_i en fonction des angles θ et ψ suivant (4.6), on obtient le système suivant:

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= M\left(\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I_2}\right)\sin\theta\sin\psi\cos\psi, \\ \dot{\phi} &= M\left(\frac{\sin^2\psi}{I_3} + \frac{\cos^2\psi}{I_2}\right), \\ \dot{\psi} &= M\left(\frac{1}{I_1} - \frac{\sin^2\psi}{I_3} - \frac{\cos^2\psi}{I_2}\right)\cos\theta. \end{aligned} \tag{4.8}$$

On introduit les paramètres sans unité suivants qui vont nous permettre de simplifier le système:

$$a = \frac{I_2}{I_1} - 1, \quad b = 1 - \frac{I_2}{I_3}, \quad \gamma = \frac{2I_2E}{M^2} - 1. \tag{4.9}$$

Ces paramètres s'interprètent facilement. Le coefficient γ indique à quel point la trajectoire est éloignée de la séparatrice, pour laquelle $\gamma = 0$. Si $\gamma < 0$, les trajectoires sont oscillantes alors que si $\gamma > 0$ elles sont tournantes. Les coefficients a et b sont reliés aux symétries du solide. Par exemple, si $a = 0$ ou $b = 0$, le solide est une toupie symétrique. Si $a = b = 0$ le solide est une sphère. Le TRE étant du type $\Delta\phi = 2\pi$ et $\Delta\psi \simeq \pi$, il peut être décrit indépendamment du temps ce qui va nous permettre de réduire le nombre de coordonnées

à deux. En effet, il est suffisant de considérer le système suivant:

$$\begin{aligned}\frac{d\theta}{d\phi} &= -\frac{b\sin\theta\sin\psi\cos\psi}{1-b\sin^2\psi},\\ \frac{d\psi}{d\phi} &= \frac{(a+b\sin^2\psi)\cos\theta}{1-b\sin^2\psi}.\end{aligned} \tag{4.10}$$

La quantité γ est une intégrale première de ce système. Elle s'exprime en fonction des angles d'Euler en substituant (4.6) dans l'expression de γ, ce qui donne:

$$\gamma = a - \sin^2\theta(a + b\sin^2\psi). \tag{4.11}$$

L'hypothèse $I_1 \leq I_2 \leq I_3$ et la condition $2I_1E \leq M^2 \leq 2I_3E$ conduisent aux relations suivantes:

$$0 \leq b \leq 1, \quad 0 \leq a \leq +\infty, \quad -b \leq \gamma \leq a.$$

Les deux points d'équilibre p_+ et p_- de la figure 4.6 sont donnés respectivement par $\gamma = a$ et $\gamma = -b$.

L'équation qui nous intéresse pour le TRE est la deuxième équation du système (4.10). En effet, le TRE peut s'écrire sous la forme suivante:

$$\Delta\psi|_{\Delta\phi=2\pi} \simeq \pi, \tag{4.12}$$

ce qui s'obtient en intégrant ladite équation. Nous discuterons néanmoins des deux équations afin d'avoir une bonne idée de la dynamique générale du solide.

4.4 Dynamique générale

Nous avons vu que lorsque les solutions sont tournantes, l'angle ψ est strictement croissant (ou non borné), alors qu'il oscille lorsque les solutions sont oscillantes. En partant de l'équation (4.11), on peut montrer que:

$$\cos\theta = S\sqrt{\frac{\gamma + b\sin^2\psi}{a + b\sin^2\psi}}, \tag{4.13}$$

avec S une fonction signe. En substituant dans la deuxième équation du système (4.10), on obtient:

$$\frac{d\psi}{d\phi} = S\frac{\sqrt{a+b\sin^2\psi}\sqrt{\gamma+b\sin^2\psi}}{1-b\sin^2\psi}. \tag{4.14}$$

Suivant la valeur du paramètre γ, cette équation est l'équation paramétrique de trajectoires fermées ou non qui sont représentées sur la figure 4.7. On distingue sur cette figure deux points d'équilibre: un stable pour $\psi = \pi/2$ et un instable pour $\psi = 0$. Le point stable correspond à une rotation autour de l'axe $\vec{e}_3$ de la raquette et le point instable à une rotation autour de l'axe intermédiaire $\vec{e}_2$. Remarquons que sur cette figure, entre deux points d'équilibre instable, l'angle ψ varie de π. S'agissant de points d'équilibre, le

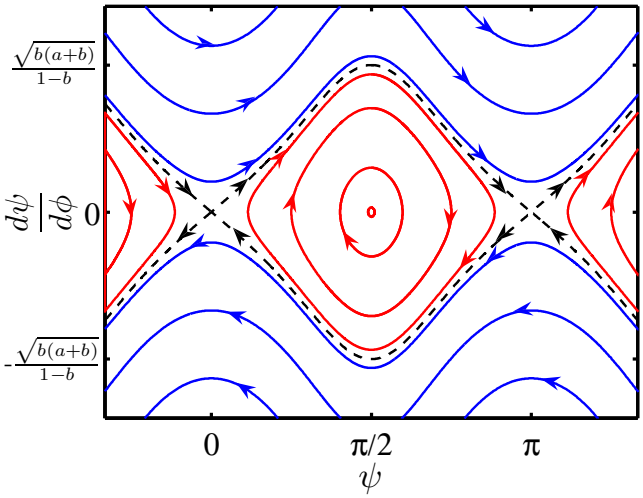

FIGURE 4.7 – Diagramme de phase du flip. Les courbes rouges correspondent aux solutions oscillantes ($\gamma < 0$), les courbes bleues aux solutions tournantes ($\gamma > 0$) et la ligne en pointillés à la séparatrice ($\gamma = 0$).

passage dans le voisinage d'un de ces points est d'autant plus long que l'on passe proche de ce point. Ainsi, pour une trajectoire voisine de la séparatrice, l'angle ψ effectue des sauts de π. En d'autres termes, la raquette à tendance à faire des flips égaux à π autour de son manche. Cependant, cette figure ne nous donne pas la variation de ϕ, i.e. la rotations du manche dans l'espace. Plus généralement, pour une trajectoire bleue ($\gamma > 0$), pendant que ϕ varie, la raquette tourne autour de son manche, alors qu'elle oscille pour une trajectoire rouge ($\gamma < 0$). Ce portrait de phase est très similaire à celui d'un pendule mais la position d'équilibre instable du pendule est remplacée par une rotation de la raquette autour de son axe intermédiaire. De plus, pour un pendule, les points d'équilibre instable sont séparés de 2π contre π ici.

On voit que pour $\gamma > 0$ la dérivé $d\psi/d\phi$ est toujours positive (ou toujours négative), ce qui implique que S est constant. Pour $\gamma < 0$, la fonction signe S change quand l'angle ψ est maximum ou minimum. On peut calculer ces extrema en remarquant que le terme $\sqrt{\gamma + b\sin^2\psi}$ de l'équation (4.13) doit être positif alors que le paramètre γ est négatif. On peut montrer par un simple calcul que $\psi \in [\psi_{\min}, \psi_{\max}]$, avec:

$$\psi_{\min} = \arcsin\left[\sqrt{\frac{|\gamma|}{b}}\right], \quad \psi_{\max} = \pi - \arcsin\left[\sqrt{\frac{|\gamma|}{b}}\right]. \tag{4.15}$$

Pour compléter l'analyse générale, nous allons adopter la même démarche pour comprendre la dynamique de l'angle θ qui est donnée par la première équation du système (4.10). L'équation (4.11) permet de montrer que:

$$\sin\psi\cos\psi = \frac{S_2}{b\sin^2\theta}\sqrt{(\gamma + b - (a+b)\cos^2\theta)(a\cos^2\theta - \gamma)}, \tag{4.16}$$

où S_2 est une fonction signe. On en déduit que la dynamique de l'angle θ est gouvernée

par l'équation:

$$\frac{d\theta}{d\phi} = -S_2 \sin\theta \frac{\sqrt{(\gamma + b - (a+b)\cos^2\theta)(a\cos^2\theta - \gamma)}}{\gamma + 1 - (a+1)\cos^2\theta}, \tag{4.17}$$

ce qui est l'équation paramétrique de certaines orbites représentées sur la figure 4.8. On

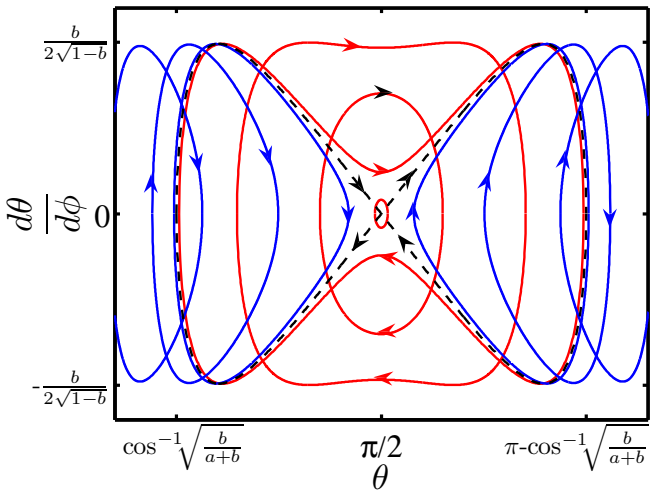

FIGURE 4.8 – Portrait de phase de l'angle θ. Les trajectoires en bleu, en rouge et en pointillés correspondent respectivement aux trajectoires tournantes, oscillantes et à la séparatrice.

remarque que la dynamique de l'angle θ ne permet pas, à elle seule, de faire la distinction entre la rotation stable autour de l'axe $\vec{e}_3$ et la rotation instable car les deux correspondent au point $(\pi/2, 0)$ de ce diagramme. On remarque aussi que pour les trois familles de solutions, l'angle θ est borné et ne peut donc qu'osciller. Comme nous l'avons dit dans la section 4.3, l'angle θ ne peut traverser la valeur $\pi/2$ que pour des solutions oscillantes. En d'autres termes, le manche peut traverser le plan $(\vec{X}, \vec{Y})$ seulement pour cette famille de solutions. On peut déterminer les valeurs limites de l'angle θ en remarquant que le terme sous la racine de l'équation (4.17) doit être positif, ce qui mène à:

$$\begin{array}{ll} \text{Si } \gamma > 0 : & \text{Si } \gamma < 0 : \\ \theta_{\min} = \arccos[\sqrt{\frac{\gamma+b}{a+b}}], & \theta_{\min} = \arccos[\sqrt{\frac{\gamma+b}{a+b}}], \\ \theta_{\max} = \arccos[\sqrt{\frac{\gamma}{a}}]. & \theta_{\max} = \pi - \arccos[\sqrt{\frac{\gamma+b}{a+b}}]. \end{array} \tag{4.18}$$

La dynamique du manche de la raquette est illustrée sur la figure 4.9.

4.5 Théorème de la raquette de tennis

Pour l'effet de la raquette de tennis, nous sommes intéressés par la deuxième équation du système (4.10) car elle est nécessaire pour montrer que $\Delta\psi|_{\Delta\phi=2\pi} \simeq \pi$. De plus, l'expérience de la raquette consiste à la jeter de sorte que $\psi_0 \simeq 0$ en essayant de ne pas

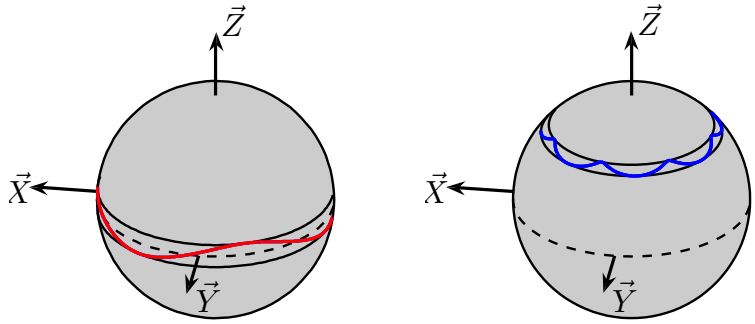

FIGURE 4.9 – Illustration du mouvement du manche de la raquette sur la sphère pour $\gamma < 0$ (à gauche) et $\gamma > 0$ (à droite). Les lignes noires correspondent aux valeurs limites de θ.

lui donner de vitesse de rotation autour de son manche, c'est-à-dire de telle sorte que $d\psi/d\phi|_0 \simeq 0$. Ceci correspond au voisinage du point d'équilibre instable $(0, 0)$ du diagramme de phase de la figure 4.7. Dans ces conditions, le système suit nécessairement une trajectoire proche de la séparatrice. Dans le cas général, le système ne s'intègre pas avec des fonctions simples [94]. Nous choisissons donc de faire un développement asymptotique des solutions dans le voisinage de $\gamma = 0$ pour avoir une formule plus exploitable. En imposant la condition $\Delta\phi = 2\pi$, l'équation (4.10) conduit à:

$$\int_{\psi_0}^{\psi_f} f(a, b, \gamma, \psi) d\psi = 2\pi, \tag{4.19}$$

avec:

$$f(a, b, \gamma, \psi) = S \frac{1 - b \sin^2 \psi}{\sqrt{a + b \sin^2 \psi}\sqrt{\gamma + b \sin^2 \psi}}. \tag{4.20}$$

Remarquons que si ψ_0 et ψ_f sont fixés (de préférence proches de 0 et π pour un TRE), l'intégration de cette équation donne des conditions sur les paramètres γ, a et b pour que l'égalité soit vraie. Elle donne donc à la fois des contraintes sur les conditions initiales, qui, comme nous allons le voir, sont directement liées à γ, ainsi que sur les propriétés du solide caractérisées par les paramètres a et b. On se concentre dans la suite de cette section sur des trajectoires symétriques telles que:

$$\psi_0 = \epsilon, \quad \psi_f = \pi - \epsilon, \tag{4.21}$$

où $\epsilon > 0$ est un petit paramètre. Le paramètre ϵ est le décalage au flip parfait de π. Ce choix est motivé par le fait que pour une variation $\Delta\phi$ fixée (ou un temps fixé), la variation $\Delta\psi$ est maximum lorsque la solution est symétrique. Cette variation est de la forme $\psi_f = \pi - \psi_0$. Cela peut se comprendre sur la figure 4.10. En effet, une autre trajectoire aurait nécessairement une extrémité plus proche d'un point d'équilibre instable, point autour duquel l'angle ψ varie lentement. La variation $\Delta\psi$ serait donc plus petite.

La méthode que nous allons présenter peut-être généralisée pour des trajectoires qui ne sont pas nécessairement symétriques, mais cela complique les calculs. On suppose que

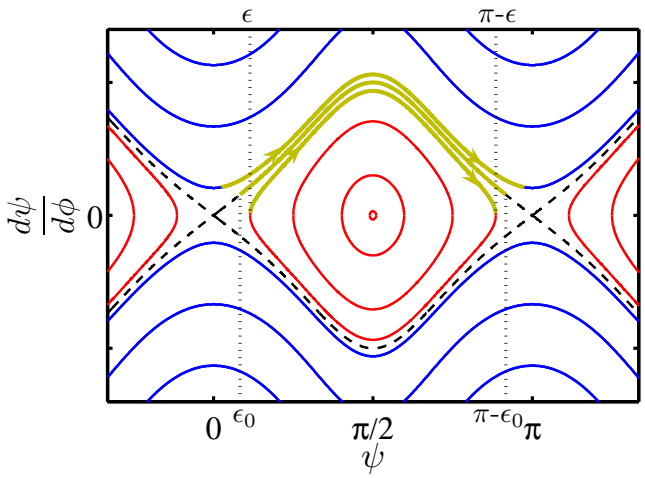

FIGURE 4.10 – Type de trajectoires considérées pour le calcul analytique du TRE (en jaune). Pour chacune de ces trajectoires, la variation $\Delta\phi$ du manche dans l'espace est de sorte que $\Delta\phi = 2\pi$. Le paramètre ϵ_0 représente le décalage au flip parfait ($\Delta\psi|_{\Delta\phi=2\pi} = \pi$) sur la séparatrice. Le paramètre ϵ représente le décalage au flip parfait sur les trajectoires voisines de la séparatrice.

si les trajectoires voisines de cette trajectoire symétrique correspondent à un TRE, alors cette dernière correspond aussi à un TRE.

Dans ce contexte, le TRE est donné par la formule:

$$\Delta\psi|_{\Delta\phi=2\pi} = \pi - 2\epsilon. \tag{4.22}$$

La valeur $\epsilon = 0$ correspond à un TRE exact. L'idée est d'exprimer le paramètre ϵ comme un développement asymptotique de la forme:

$$\epsilon = \epsilon_0 + \left.\frac{d\epsilon}{d\gamma}\right|_{\gamma=0} + O(\gamma^2). \tag{4.23}$$

Cette formule permet d'avoir une interprétation des propriétés de robustesse du TRE à la fois en fonction des conditions initiales et des propriétés du solide. En effet, on rappelle que le paramètre γ nous dit à quel point la trajectoire est éloignée de la séparatrice. Or, γ est une constante du mouvement qui dépend uniquement des conditions initiales. Autrement dit, un lancer bien réussi, c'est-à-dire dont la rotation est bien autour de l'axe $\vec{e}_2$, va impliquer que le paramètre γ tend vers zéro alors qu'un lancer raté implique que la valeur de γ est relativement grande. Le coefficient ϵ_0 est un paramètre qui ne dépend que de la géométrie du solide. En effet, il représente le maximum de variation de l'angle ψ pour une variation $\Delta\phi = 2\pi$ sur la séparatrice, dont les propriétés dépendent uniquement des paramètres a et b qui sont eux même caractéristiques de la forme du solide. Comme nous nous intéressons qu'à des objets qui ont la propriété de réaliser un TRE au voisinage et sur la séparatrice, nous supposerons que ϵ_0 est petit, ce qui est vrai sous certaines conditions sur a et b que nous allons exprimer.

Théorème 4.5.1 *Le décalage au TRE ϵ est donné par:*

$$\epsilon(\gamma) = \epsilon_0 - \frac{\gamma}{4b\epsilon_0} + O(\gamma^2). \tag{4.24}$$

Si le produit ab est grand, ϵ_0 est de la forme:

$$\epsilon_0 = e^{-\sqrt{ab}\pi}\left(2\sqrt{\tfrac{a}{a+b}}e^{-\frac{b}{\sqrt{1+b/a}}}\right) + o\left(e^{-2\sqrt{ab}\pi}\right). \tag{4.25}$$

Remarque 4.5.2 *Le paramètre ϵ_0 tend de manière exponentielle vers zéro, lorsque le produit $ab \to \infty$. Pour des paramètres a et b fixés, l'écart au TRE ϵ tend vers ϵ_0 quand γ tend vers zéro à une vitesse $\gamma/(4b\epsilon_0)$.*

La démonstration étant longue, nous la détaillerons à la fin de cette partie dans la section 4.9. Cette formule nous permet d'évaluer à quel point l'effet de la raquette de tennis est vrai dans la région de la séparatrice, qui, on le rappelle, est la région qui nous intéresse puisque le lancer de la raquette implique une dynamique proche de la séparatrice. Cette formule nous dit que le TRE nécessite deux conditions, qui sont ϵ_0 petit, c'est-à-dire un produit *ab* grand, et γ petit, c'est-à-dire des conditions initiales proches de du point d'équilibre instable. Pour une raquette de tennis standard [1], on obtient avec notre formule:

$$\epsilon_0 = 0.1150 \text{ rad}, \tag{4.26}$$

c'est-à-dire un flip de $\Delta\psi|_{\Delta\phi=2\pi} = \pi(1 - 0.073)$ radians le long de la séparatrice. Une intégration numérique sans approximation donne le même résultat à 10^{-3} radian près.

Pour illustrer le théorème 4.5.1, nous allons nous intéresser au comportement de $\epsilon(\gamma)$ donné par la formule (4.24) dans le plan (ϵ_0, γ). On fixe $b = 0.1$, puis on calcule pour chaque couple (ϵ_0, γ) la valeur correspondante de ϵ. Le résultat est donné sur la figure 4.11. On rappelle que le paramètre ϵ_0 ne dépend que des propriétés du solide et que le TRE a lieu lorsque $\epsilon(\gamma)$ est petit. Cette figure montre que plus le paramètre ϵ_0 est petit, plus le TRE apparaît pour des valeurs de γ proche de 0 et donc proche de la séparatrice. Cependant, dans ce cas, il n'apparaît que pour une plage de valeurs de γ très restreinte et il est donc peu robuste. Au contraire, lorsque ϵ_0 est grand, l'effet est plus robuste. Si ϵ_0 est trop grand, on devine par extrapolation que le TRE apparaît très loin de la séparatrice. Il est alors difficile le considérer comme un TRE. En effet, dans ce dernier cas, il faudrait jeter la raquette avec des conditions initiales éloignées de la rotation instable, autrement dit faire exprès de donner un mouvement de flip à la raquette pour obtenir un flip égal à π.

1. On appelle raquette standard la raquette utilisée dans [112] dont les moments d'inertie principaux sont $I_1 = 0.121 \times 10^{-2}$ kg.m^2, $I_2 = 1.638 \times 10^{-2}$ kg.m^2, $I_3 = 1.748 \times 10^{-2}$ kg.m^2 [114].

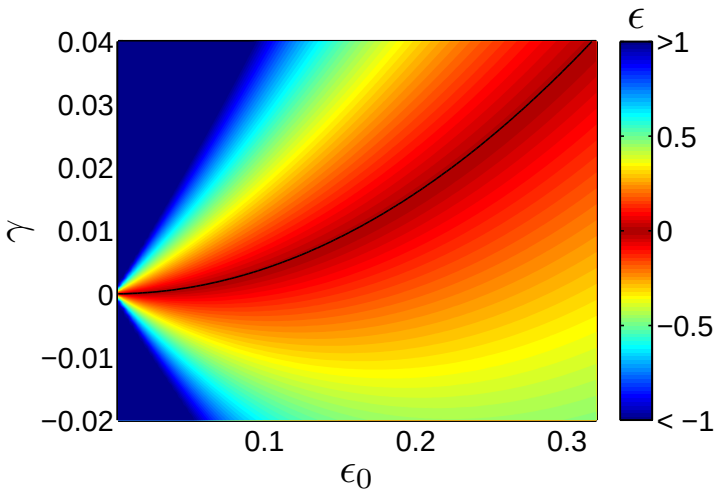

FIGURE 4.11 – Valeur de $\epsilon(\gamma)$ dans le plan (ϵ_0, γ) pour $b = 0.1$. La ligne noire correspond à un flip exact, i.e. $\Delta\psi_{\Delta\phi=2\pi} = \pi$. Une autre valeur du paramètre b ne change pas la structure de cette figure.

4.6 Analyse numérique

Dans cette section, nous analysons le comportement général des trajectoires et de la robustesse du TRE en intégrant numériquement le système (4.10). On considère la même raquette que dans la section précédente. Les paramètres a et b étant fixés, nous avons deux paramètres à déterminer parmi γ, ψ_0 et $d\psi/d\phi|_0$, le troisième s'exprimant en fonction des deux autres. Dans un premier temps, on trace les solutions de l'équation $\psi = f(\phi)$ pour différentes valeurs de γ et de ψ_0. Elles sont représentées sur la figure 4.12. On peut voir sur cette figure que le TRE a lieu nécessairement suffisamment proche de la séparatrice à peu près pour $|\gamma| < 10^{-2}$. Sur la figure 4.13, on trace la robustesse du TRE dans le plan des conditions initiales $(\psi_0, d\psi/d\phi|_0)$. Plus exactement, cette figure donne la valeur de $|\Delta\psi|_{\Delta\phi=2\pi}$ pour chaque condition initiale. On rappelle que dans ce plan, le point $(0, 0)$ correspond à des conditions initiales qui implique que la raquette tourne exactement autour de son axe intermédiaire. On remarque que le TRE a très souvent lieu autour de ce point. On peut aussi remarquer la symétrie particulière de cette figure. Localement, on voit qu'autour du point d'équilibre instable et très proche de la séparatrice, il existe certains points pour lesquels le TRE n'est pas du tout réalisé. Cette structure se comprend à partir du diagramme de phase de la figure 4.7. En effet, ces points sont des conditions initiales particulières à partir desquelles le système évolue vers le point d'équilibre instable $(0, 0)$ voisin ce qui induit une faible variation $\Delta\psi$.

4.7 Étude de différents objets

Le paramètre ϵ_0 est un bon indicateur pour savoir si le TRE est validé ou pas pour un objet donné. La figure 4.14 donne la valeur de ϵ_0 en fonction des paramètres a et b. Nous

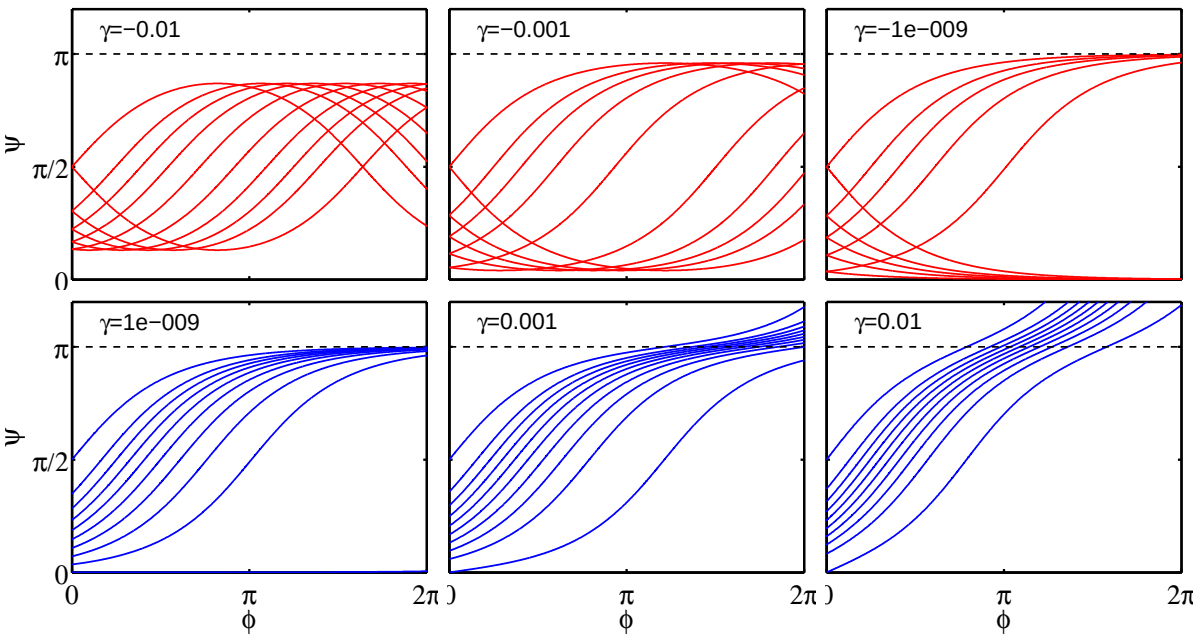

FIGURE 4.12 – Solutions de l'équation $\psi = f(\phi)$ pour différentes valeurs inititiales de l'angle ψ_0 et différentes valeurs de γ. Les courbes en rouge et en bleu correspondent aux solutions oscillantes et tournantes respectivement, c'est-à-dire telles que $\gamma < 0$ et $\gamma > 0$.

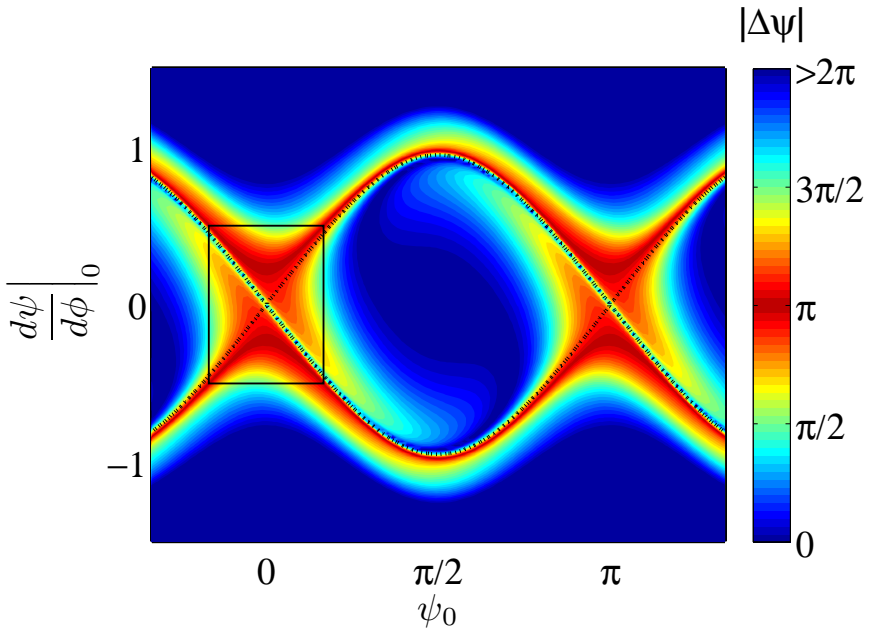

FIGURE 4.13 – Valeur de $|\Delta\psi|$ après une précession du manche dans l'espace $\Delta\phi = 2\pi$ en fonction des conditions initiales $(\psi_0, (d\psi/d\phi)_0)$. La ligne noire en pointillés est la séparatrice, donnée par $\gamma = 0$. Le domaine encadré est une plage de conditions initiales probables, proche du point d'équilibre instable.

avons mis sur cette figure différents points correspondant à la raquette standard et trois autres raquettes pour lesquelles les moments d'inertie principaux sont donnés dans [115].

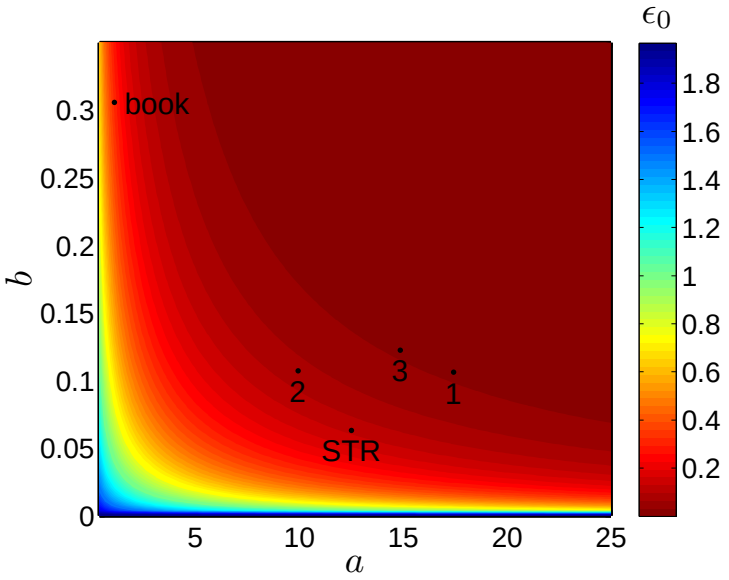

FIGURE 4.14 – Valeur du paramètre ϵ_0 en fonction de a et b. Les points représentent la position dans ce diagramme des différents solides du tableau 4.1.

Nous donnons aussi une estimation du TRE pour le livre de Goldstein [94]. Les moments d'inertie principaux sont directement calculables si l'on considère le livre comme un pavé solide. Les trois axes d'inertie principaux sont les suivants: dans le sens de la longueur ($\vec{e}_1$), de la largeur ($\vec{e}_2$), et perpendiculaire au plan du livre ($\vec{e}_3$). On obtient:

$$a = 1.11,\ b = 0.31. \tag{4.27}$$

L'évaluation du TRE $\Delta\psi|_{\gamma=0} = \pi - 2\epsilon_0$ sur la séparatrice est donnée dans le tableau 4.1 pour chaque objet. La figure 4.14 montre bien que le paramètre ϵ_0 tend exponentiellement

Solide	I_1	I_2	I_3	a	b	ϵ_0	$\Delta\psi\|_{\gamma=0}$ (°)
Raquette (STR)	1210	16380	17480	12.54	0.06	0.1150	166.8
Raquette 1	886	16336	18270	17.44	0.11	0.0251	177.1
Raquette 2	1319	14445	16175	9.95	0.11	0.0699	172.0
Raquette 3	448	7126	1818	14.88	0.12	0.0255	177.1
Livre [94]				1.11	0.31	0.2139	155.5

TABLE 4.1 – Effet de la raquette de tennis sur la séparatrice pour différents solides. Les moments d'inertie principaux sont exprimés en kg.mm^{-1}.s^{-2} et les angles en degrés.

vers 0 quand $ab \to \infty$ par l'allure hyperbolique des courbes de niveau. L'effet de la raquette de tennis est donc d'autant plus exact que le produit ab est grand. Il est aussi d'autant moins robuste puisque plus ϵ_0 est petit et plus $\epsilon(\gamma)$ donné par la formule (4.24) varie

rapidement en fonction de γ (cf. Fig. 4.11), c'est-à-dire qu'il est d'autant plus sensible aux conditions initiales.

4.8 Conclusion

Bien qu'une analyse de l'effet de la raquette de tennis ait déjà été proposée dans [112], nous avons pu approfondir considérablement l'étude par un choix adéquat de coordonnées ce qui nous a permis de calculer une formule asymptotique simple qui décrit la validité de cet effet sur tout type de solide. L'étude montre que l'effet est d'autant plus marqué que l'objet est asymétrique, c'est-à-dire que I_1, I_2 et I_3 sont éloignés les uns des autres (cela correspond au critère $ab \gg 1$). Nous avons vu que pour une raquette de tennis standard, cet effet est robuste, ce qui explique le résultat presque systématique de l'expérience de la raquette. Un point important est que nous n'avons considéré que le modèle de la toupie d'Euler, ce qui signifie que tout système gouverné par les mêmes équations est concerné par cet effet. Par exemple, nous avons vu dans le chapitre 3 que le contrôle optimal d'une chaîne de trois spins possède la même dynamique. C'est aussi le cas pour un système quantique à trois niveaux d'énergies [103]. Nous allons montrer dans le chapitre suivant que les équations d'Euler constituent une solution particulière des équations de Bloch et que cet effet peut être observé pour le contrôle d'un système quantique à deux niveaux. Un autre point intéressant serait d'étudier le rôle possible de cet effet sur un joueur de tennis [114, 116]. En effet, il est naturel de se demander si lorsqu'un joueur effectue un coup droit par exemple, qui implique une rotation autour de l'axe instable de la raquette, cet effet peut-être gênant pour le joueur ou s'il est négligeable.

4.9 Démonstration du théorème de la raquette de Tennis

Cette section est consacrée à la démonstration du théorème 4.5.1. Il s'agit d'une démonstration originale tirée de l'article [110] que nous avons soumis à Physica D. On rappelle que le but est d'exprimer le décalage au TRE, qui correspond à $\epsilon(\gamma)$ dans le voisinage de $\gamma = 0$, comme la somme de deux termes:

$$\epsilon(\gamma) = \epsilon_0 + \gamma \left.\frac{d\epsilon}{d\gamma}\right|_{\gamma=0}. \tag{4.28}$$

Les termes ϵ_0 et $d\epsilon/d\gamma|_{\gamma=0}$ sont calculés séparément.

Calcul de ϵ_0

On rappelle que ϵ_0 est le décalage au TRE sur la séparatrice. Il se calcule donc en substituant $\gamma = 0$, $\psi_0 = \epsilon_0$ et $\psi_f = \pi - \epsilon_0$ dans l'intégrale (4.19), c'est-à-dire en intégrant:

$$\int_{\epsilon_0}^{\pi-\epsilon_0} f(a, b, \psi, 0) d\psi = 2\pi, \tag{4.29}$$

avec

$$f(a, b, \gamma, 0) = S \frac{1 - b \sin^2 \psi}{\sqrt{a + b \sin^2 \psi} \sqrt{b \sin^2 \psi}}.$$

On part d'un point de la séparatrice de sorte que $(d\psi/d\phi)_0 > 0$ et $\psi_0 = \epsilon_0 > 0$. Comme la dynamique ne peut pas traverser le point d'équilibre instable en $(\pi, 0)$ du portrait de phase de la figure 4.7, la dérivée $d\psi/d\phi$ est de signe constant, soit $S = +1$. On introduit la variable x suivante:

$$x = \sqrt{\frac{b}{a+b}} \cos \psi,$$

et on arrive après quelques manipulations à:

$$\int_{x_0}^{-x_0} \frac{dx}{(1 - \frac{a+b}{b} x^2)\sqrt{1 - x^2}} - b \frac{dx}{\sqrt{1 - x^2}} = -2\pi b.$$

En intégrant, on obtient:

$$\operatorname{arctanh}\left(\sqrt{\frac{a}{b}} \frac{x_0}{\sqrt{1 - x_0^2}} \right) - \sqrt{ab}\ \arcsin(x_0) = \sqrt{ab}\ \pi.$$

La fonction arctanh s'exprime en fonction du logarithme népérien suivant $\operatorname{arctanh}(u) = \frac{1}{2} \ln[(1+u)/(1-u)]$. En prenant l'exponentielle, puis l'inverse, on arrive à:

$$\frac{\sqrt{1 + \frac{b}{a} \sin^2 \epsilon_0} - \cos \epsilon_0}{\sqrt{1 + \frac{b}{a} \sin^2 \epsilon_0} + \cos \epsilon_0} = e^{-2\sqrt{ab}\left[\pi + \arcsin\left(\sqrt{\frac{b}{a+b}} \cos \epsilon_0\right)\right]}.$$

La valeur $\epsilon_0 = 0$ est une solution asymptotique de cette équation lorsque $ab \to +\infty$. Quand $ab \gg 1$, le terme dominant de cette équation est le terme exponentielle. En faisant un développement limité en ϵ_0 petit du terme de gauche, on obtient:

$$\frac{1}{4} \left(1 + \frac{b}{a}\right) \epsilon_0^2 + hot = e^{-2\sqrt{ab}\left[\pi + \arcsin\left(\sqrt{\frac{b}{a+b}} \cos \epsilon_0\right)\right]},$$

où *hot* désigne les termes d'ordre plus élevé ("higher order terms"). En prenant la racine carrée de cette équation, on peut montrer que:

$$\epsilon_0 + hot = 2\sqrt{\frac{a}{a+b}} e^{-\sqrt{ab}\left[\pi + \arcsin\left(\sqrt{\frac{b}{a+b}} \cos \epsilon_0\right)\right]}. \tag{4.30}$$

On s'intéresse ici aux termes dominants de cette équation pour un solide qui satisfait la condition requise par le TRE qui est $ab \gg 1$. On introduit deux nouveaux paramètres donnés par:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{ab}}, \quad \mu = \sqrt{\frac{b}{a+b}} = \frac{\lambda b}{\sqrt{1 + \lambda^2 b^2}}. \tag{4.31}$$

Remarquons que $ab \to \infty$ correspond à $\lambda \to 0$ et nécessairement à $\mu \to 0$. L'équation (4.30) devient:

$$\epsilon_0 = 2\sqrt{1-\mu^2}e^{-\frac{1}{\lambda}[\pi+\arcsin(\mu\cos\epsilon_0)]}. \tag{4.32}$$

La fonction $f(s) = e^{-1/s}$ est de classe C^∞ pour $s \neq 0$ et $f(0) = 0$ et infiniment plate à l'origine. On cherche une solution ϵ_0 de l'équation (4.32) de la forme:

$$\epsilon_0 = 2\sqrt{1-\mu^2}e^{-\frac{1}{\lambda}[\pi+\arcsin(\mu)+u]} = 2\sqrt{1-\mu^2}f\left(\frac{\lambda}{\pi+\arcsin(\mu)+u}\right), \tag{4.33}$$

avec u une fonction de λ et μ différentiable et de sorte que $u(0,0) = 0$. Remarquons que $\epsilon_0(u,\lambda,\mu)$ est lisse en $(u,\lambda,\mu) = (0,0,0)$. En injectant (4.33) dans (4.32), on obtient, après quelques manipulations:

$$G(u,\lambda,\mu) := u + \arcsin\mu - \arcsin(\mu\cos(\epsilon_0(u,\lambda\mu))) + hot = 0. \tag{4.34}$$

G est de classe C^∞ en $(u,\lambda,\mu) = (0,0,0)$, $G(0,0,0) = 0$ et $\frac{\partial G}{\partial u}(0,0,0) \neq 0$. On peut alors appliquer le théorème des fonctions implicites qui stipule qu'il existe une solution $u = u(\lambda,\mu)$ de l'équation (4.34), de classe C^∞ et qui vérifie $u(0,0) = 0$. Ceci justifie l'existence d'une solution (4.32) de la forme (4.33). Si $\lim_{\lambda\to 0}(u,\mu) = (0,0)$, alors on a $\lim_{\lambda\to 0}\epsilon_0 = 0$. Pour tout $\delta > 0$, on obtient $\epsilon_0 = o(e^{-(\pi-\delta)/\lambda})$ lorsque $\lambda \to 0$. La dernière étape consiste à examiner la façon dont u dépend de λ. On utilise encore le théorème des fonctions implicites, ce qui donne:

$$\frac{du}{d\lambda} = -\frac{\frac{dG}{d\lambda}}{\frac{dG}{du}}(0,0,0). \tag{4.35}$$

On a $\frac{dG}{du}(0,0,0) = 1$. On a d'autre part:

$$dG/d\lambda = \frac{\partial G}{\partial\lambda} + \frac{\partial G}{\partial\mu}\frac{\partial\mu}{\partial\lambda}. \tag{4.36}$$

Comme $\frac{\partial G}{\partial\lambda}(0,0,0) = 0$, on en déduit que $\frac{\partial\mu}{\partial\lambda} = 0$. Par conséquent, on a:

$$\frac{du}{d\lambda}(0,0,0) = 0, \tag{4.37}$$

soit $u = O(\lambda^2)$. En substituant les expressions de u et μ dans (4.33), on a finalement:

$$\epsilon_0 = e^{-\sqrt{ab}\pi}\left(2\sqrt{\frac{a}{a+b}}e^{-\frac{b}{\sqrt{1+b/a}}} + o\left(e^{-\sqrt{ab}\pi}\right)\right). \tag{4.38}$$

Calcul de $d\epsilon/d\gamma|_{\gamma=0}$

Par symétrie de l'angle ψ, on a:

$$\int_\epsilon^{\pi-\epsilon} f(a,b,\psi,\gamma)d\psi = 2\int_\epsilon^{\frac{\pi}{2}} f(a,b,\psi,\gamma)d\psi.$$

La dynamique de l'angle ψ en fonction de ϕ peut s'écrire sous la forme:

$$F(a,b,\epsilon,\gamma) = \int_{\epsilon}^{\frac{\pi}{2}} f(a,b,\psi,\gamma)d\psi = \pi.$$

On a:

$$\left.\frac{\partial\epsilon}{\partial\gamma}\right|_{\gamma=0} = -\left(\frac{\partial\epsilon}{\partial F}\frac{\partial F}{\partial\gamma}\right)\Bigg|_{\gamma=0}. \tag{4.39}$$

Le terme $\partial\epsilon/\partial F$ peut se calculer facilement. La dérivée par rapport à l'un des bords de l'intégrale donne:

$$\frac{\partial F}{\partial\epsilon} = -f(a,b,\epsilon,\gamma) \Rightarrow \left.\frac{\partial\epsilon}{\partial F}\right|_{\gamma=0} = -\frac{1}{f(a,b,\epsilon_0,0)} = -S\sqrt{b}\sin\epsilon_0\frac{\sqrt{a+b\sin^2\epsilon_0}}{1-b\sin^2\epsilon_0},$$

où on a supposé que $\epsilon_0 \ll 1$. La dérivée s'exprime comme:

$$\left.\frac{\partial\epsilon}{\partial F}\right|_{\gamma=0} = -S\sqrt{ab}\,\epsilon_0 + O(\epsilon_0^2). \tag{4.40}$$

Le terme $\partial F/\partial\gamma$ est plus difficile à calculer. La convergence uniforme de l'intégrale F donne:

$$\left.\frac{\partial F}{\partial\gamma}\right|_{\gamma=0} = \int_{\epsilon_0}^{\frac{\pi}{2}} \left.\frac{\partial}{\partial\gamma}f(a,b,\psi,\gamma)\right|_{\gamma=0} d\psi.$$

La dérivée de f en $\gamma = 0$ s'écrit sous la forme:

$$\left.\frac{df}{d\gamma}\right|_{\gamma=0} = -\frac{S}{2b^{3/2}}\frac{1-b\sin^2\psi}{\sqrt{a+b\sin^2\psi}\sin^3\psi}.$$

En intégrant, on arrive à:

$$\left.\frac{dF}{d\gamma}\right|_{\gamma=0} = \left[\frac{S(a-b-2ab)}{4(ab)^{3/2}}\ln\left(\frac{\sqrt{a}\cos\psi+\sqrt{a+b\sin^2\psi}}{\sin\psi}\right) + \frac{S}{4}\frac{\sqrt{a+b\sin^2\psi}\cos\psi}{b^{3/2}a\sin^2\psi}\right]_{\epsilon_0}^{\frac{\pi}{2}}.$$

Remarquons que $\epsilon_0 \ll 1$ implique que les termes d'ordre $1/\epsilon_0^2$ sont dominants dans le terme de droite de cette équation. Un développement asymptotique donne:

$$\left.\frac{\partial F}{\partial\gamma}\right|_{\gamma=0} = -\frac{S}{4b^{3/2}\sqrt{a}\epsilon_0^2} + O(\frac{1}{\epsilon_0}). \tag{4.41}$$

Enfin, on peut calculer $\partial\epsilon/\partial\gamma|_{\gamma=0}$ en utilisant l'équation (4.39):

$$\left.\frac{\partial\epsilon}{\partial\gamma}\right|_{\gamma=0} = -\frac{1}{4b\epsilon_0} + O(1). \tag{4.42}$$

En résumé, le paramètre ϵ s'exprime sous la forme:

$$\epsilon(\gamma) = \epsilon_0 - \frac{\gamma}{4b\epsilon_0} + O(\gamma^2), \tag{4.43}$$

où ϵ_0 est donné par l'équation (4.38), et $O(\gamma^2)$ est une fonction qui dépend de ϵ_0, de sorte que $O(\gamma^2)/\gamma^2$ tend vers une constante (qui dépend de ϵ_0), quand γ tend vers zéro.

Chapitre 5

La toupie d'Euler et le spin quantique

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons montrer que les solutions de la toupie d'Euler permettent de mettre en valeur plusieurs propriétés géométriques du contrôle quantique d'un système à deux niveaux [20, 21, 27]. Nous allons voir que ce modèle est analogue aux équations de Bloch. Les composantes du vecteur vitesse angulaire $\vec{\Omega}$ de la toupie vont être utilisés comme champs de contrôle dans le système quantique. En effet, dans les équations d'Euler, les vitesses angulaires sont déterminées par les conditions initiales et les propriétés du solide, à la différence des champs de contrôle qui sont des fonctions arbitraires. Les solutions des équations d'Euler constituent donc une famille particulière de solutions des équations de Bloch.

Les résultats de ce chapitre sont généralisables pour des systèmes plus complexes comme le contrôle d'un système à trois niveaux [103], ou encore pour le contrôle optimal d'une chaîne de trois spins couplés [104], qui, comme nous l'avons vu dans le chapitre 3, a une dynamique qui est la même que celle d'une toupie asymétrique. On rappelle que les solutions géométriques ont l'avantage d'apporter une compréhension physique des processus de contrôle [35, 37, 49, 56, 117]. Certaines de ces propriétés permettent de calculer des solutions robustes par rapport aux imperfections expérimentales et en particulier aux inhomogénéités des champs de contrôle. C'est le cas de la solution d'Allen-Eberly [27, 28], une solution de forme hyperbolique qui permet de réaliser une inversion de population robuste pour un système à deux niveaux. Nous verrons que cette solution particulière apparaît naturellement dans le portrait de phase des équations d'Euler. D'autres propriétés géométriques que nous allons décrire sont utilisées en information quantique, notamment pour réaliser des portes phase à un qubit. Nous avons vu dans le chapitre 2 que ces portes phase sont très utiles car elles constituent une des trois opérations logiques nécessaires pour avoir un ensemble universel de portes, c'est-à-dire un ensemble d'opérations qui per-

met de générer n'importe quelle transformation sur un ensemble de qubits. La phase de Berry [31] est une propriété particulière d'un système quantique qui apparaît lorsque le vecteur de Bloch effectue des trajectoires périodiques sur la sphère de Bloch. Cette propriété a permis de générer expérimentalement des portes phase robustes [50], dites *portes phase géométriques*, dans le sens où elles s'expliquent par des phénomènes purement géométriques. La phase de Berry apparaît pour des solutions adiabatiques qui impliquent des processus longs [31, 32]. Une série de travaux sur les portes phase géométriques a été publiée plus récemment (voir par exemple [64, 118, 119, 120, 121]). Ces travaux visent à généraliser la phase de Berry et à réaliser des portes phase dans le régime non adiabatique pour que les transformations soient réalisables en un temps suffisamment court. Dans les équations d'Euler, le moment cinétique du solide en rotation décrit des trajectoires périodiques. Ces trajectoires permettent d'introduire une phase géométrique en mécanique classique appelée *phase de Montgomery* [33, 34]. Le lien entre cette propriété et les phases quantiques sera établi dans ce chapitre.

L'analogie des équations de Bloch avec un solide en rotation libre va également nous permettre de mettre en œuvre *l'effet de la raquette de tennis quantique*. Celui-ci consiste à déterminer les champs de contrôle associés à la trajectoire de l'effet de la raquette de tennis classique que nous avons vu dans le chapitre précédent afin de les appliquer pour contrôler la dynamique d'un système quantique à deux niveaux. Nous verrons que ces champs de contrôle réalisent une porte particulière ayant certaines propriétés de robustesse. Plus généralement, dans ce modèle, les champs de contrôle sont donnés par des fonctions elliptiques de Jacobi [95] (cf. annexe A) paramétrées par les paramètres k et E, c'est-à-dire par les moments principaux d'inertie du solide et les conditions initiales de sa dynamique. Nous verrons que ces deux paramètres permettent d'ajuster la robustesse et le temps de contrôle du système.

Ce chapitre s'organise de la manière suivante. Dans la section 5.2, on introduit les systèmes d'Euler et de Bloch, afin d'identifier les deux modèles de façon formelle. Nous introduisons deux configurations possibles des équations de Bloch, ce qui amène à deux identifications différentes entre le système classique et le système quantique. On les nomme configuration (a) et configuration (b). On se sert de la configuration (a) pour identifier les différentes familles de contrôles et pour réaliser une inversion de population dans la section 5.3. Cette section met en valeur les propriétés de robustesse du transfert en fonction des deux paramètres E et k. Dans la configuration (b), les conventions sont identiques à celles du chapitre précédent sur l'effet de la raquette de tennis classique. On étudie cette configuration dans la section 5.4, dans laquelle on donne une méthode générale qui permet de réaliser des transformations unitaires. On insiste sur un cas particulier, *l'effet de la raquette de tennis quantique*, qui a été implémenté expérimentalement à l'Université Technique de Munich par des membres de l'équipe de Steffen Glaser. Cette expérience est également détaillée dans ce chapitre. La section 5.5 est consacrée à une propriété particulière des équations d'Euler, la *phase de Montgomery*, qui permet d'implémenter

des portes phase géométriques. La section 5.6 est la conclusion de ce chapitre. Ce travail a donné lieu à la soumission d'un article [122].

5.2 Modèle

Dans la section 2.6 du chapitre 2, nous avons vu que les équations de Bloch et les équations d'Euler ont toutes les deux une structure de la forme:

$$\dot{\vec{M}} = \begin{pmatrix} 0 & \Omega_3 & -\Omega_2 \\ -\Omega_3 & 0 & \Omega_1 \\ \Omega_2 & -\Omega_1 & 0 \end{pmatrix} \vec{M}. \tag{5.1}$$

Dans le cas des équations d'Euler, $\vec{M}$ est le moment cinétique et les variables Ω_i sont les composantes du vecteur vitesse angulaire de la toupie. Ces dernières s'expriment en fonction des composantes de $\vec{M}$ et des moments d'inertie principaux du solide I_1, I_2 et I_3 sous la forme:

$$\Omega_1 = \frac{M_1}{I_1}, \quad \Omega_2 = \frac{M_2}{I_2}, \quad \Omega_3 = \frac{M_3}{I_3}. \tag{5.2}$$

Les moments d'inertie principaux correspondent à la répartition de la masse du solide selon ses trois *axes d'inertie principaux*, qui constituent le repère dans lequel le tenseur d'inertie est diagonal [93]. Pour un solide homogène, les moments d'inertie principaux caractérisent la forme du solide. En substituant (5.2) dans (5.1), on obtient les équations d'Euler, qui expriment la dynamique du moment cinétique $\vec{M}$ dans le repère attaché aux axes d'inertie principaux du solide. On note ce repère $\mathcal{S} = (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$.

Dans le cas des équations de Bloch, les variables Ω_i correspondent aux composantes du champ de contrôle et $\vec{M}$ est l'aimantation, ou vecteur de Bloch [20]. Sa dynamique est la même que celle d'une toupie en rotation libre si l'on choisit le champ de contrôle de sorte que $M_1 = I_1\Omega_1$, $M_2 = I_2\Omega_2$ et $M_3 = I_3\Omega_3$, c'est-à-dire en considérant que le champ de contrôle correspond au vecteur vitesse angulaire d'une toupie d'Euler. Dans ce cas, les paramètres I_1, I_2 et I_3 sont arbitraires et permettent de modifier la forme de la toupie fictive. Le repère $\mathcal{S} = (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ est alors attaché à la sphère de Bloch.

Dans ce chapitre, nous appellerons les *trajectoires classiques* les solutions obtenues en résolvant les équations d'Euler suivantes:

$$\dot{\vec{M}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{M_3}{I_3} & -\frac{M_2}{I_2} \\ -\frac{M_3}{I_3} & 0 & \frac{M_1}{I_1} \\ \frac{M_2}{I_2} & -\frac{M_1}{I_1} & 0 \end{pmatrix} \vec{M}. \tag{5.3}$$

Ce système est intégrable puisqu'il contient deux constantes du mouvement qui sont l'énergie et le moment cinétique, données par:

$$2E = \frac{L_1^2}{I_1} + \frac{L_2^2}{I_2} + \frac{L_3^2}{I_3}, \quad M^2 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2. \tag{5.4}$$

A chaque trajectoire classique est associé un champ de contrôle $\vec{\Omega}$, dont les composantes sont données suivant la formule $\Omega_i = M_i/I_i$. Cependant, pour le contrôle d'un système à deux niveaux, le champ de contrôle n'a généralement que deux composantes du fait des contraintes expérimentales en RMN [20] ou en physique moléculaire [39]. Nous allons voir que cela implique une certaine contrainte sur le choix des paramètres I_1, I_2 et I_3 et que deux configurations différentes sont à analyser.

Pour expliciter précisément l'identification entre les deux dynamiques, reprenons les équations de base de la mécanique quantique. On considère pour cela un système à deux niveaux décrit par un état $|\lambda(t)\rangle$, dont la dynamique est gouvernée par l'équation de Schrödinger $i\hbar\partial_t |\lambda\rangle = \hat{H} |\lambda\rangle$, où $\hat{H}$ est l'opérateur Hamiltonien de la forme:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \delta(t) & \Omega(t)e^{-i\eta(t)} \\ \Omega(t)e^{i\eta(t)} & -\delta(t) \end{pmatrix}. \tag{5.5}$$

Ω et η sont l'amplitude et la phase du champ de contrôle et δ est le décalage par rapport à la fréquence de Larmor du système [20]. En appliquant une transformation unitaire de la forme $T = \mathrm{diag}[e^{-i\eta(t)}, e^{i\eta(t)}]$, l'état du système est décrit par $|\zeta\rangle = T^\dagger |\lambda\rangle$ et le nouveau Hamiltonien est de la forme:

$$H = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \Delta(t) & \Omega(t) \\ \Omega(t) & -\Delta(t) \end{pmatrix}, \tag{5.6}$$

avec $\Delta = \delta + \eta$ et Ω les deux composantes du champ de contrôle. On peut aussi choisir d'étudier le système à la résonance, en substituant $\delta = 0$ dans l'équation (5.5). Dans ce cas, l'opérateur Hamiltonien s'écrit:

$$H = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \omega_1 - i\omega_2 \\ \omega_1 + i\omega_2 & 0 \end{pmatrix}, \tag{5.7}$$

où ω_1 et ω_2 sont les deux composantes du champ de contrôle. Les coordonnées du vecteur de Bloch sont données en fonction de la matrice densité du système $\hat{\rho} = |\zeta\rangle\langle\zeta|$ par $M_1 = \hat{\rho}_{21} + \hat{\rho}_{12}$, $M_2 = i(\hat{\rho}_{12} - \hat{\rho}_{21})$, et $M_3 = \hat{\rho}_{11} - \hat{\rho}_{22}$. Les équations de Bloch s'obtiennent en appliquant l'équation de Liouville Von Neumann $\dot{\hat{\rho}} = -i/\hbar[H, \hat{\rho}]$. Les Hamiltoniens (5.6) et (5.7) conduisent aux deux systèmes du tableau 5.1.

Configuration (a)	Configuration (b)
$\dot{\vec{M}} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta & 0 \\ -\Delta & 0 & \Omega \\ 0 & -\Omega & 0 \end{pmatrix}\vec{M}$	$\dot{\vec{M}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\omega_2 \\ 0 & 0 & \omega_1 \\ \omega_2 & -\omega_1 & 0 \end{pmatrix}\vec{M}.$

TABLE 5.1 – Equations de Bloch associées au Hamiltonien (5.6) (configuration (a)), et au Hamiltonien (5.7) (configuration (b)).

Ces équations ayant la même forme que (5.1), on identifie le vecteur de Bloch avec le moment cinétique d'une toupie asymétrique. Pour aboutir aux équations d'Euler, on

pose $\vec{\Omega} = \mathrm{diag}(1/I_1, 1/I_2, 1/I_3)\vec{M}$. Cependant, l'une des composantes de $\vec{\Omega}$ étant nécessairement nulle, on doit considérer, dans chaque cas, une toupie particulière dont l'un des moments d'inertie principaux tend vers l'infini. Les configurations (a) et (b) du tableau 5.1 correspondent respectivement à un solide dont les moments d'inertie vérifient $I_2 \to \infty$ et $I_3 \to \infty$. Dans le cas (a), nous considérons $I_1 \leq I_3 \leq I_2$, et $I_1 \leq I_2 \leq I_3$ dans le cas (b). Nous avons vu que les équations d'Euler contiennent deux constantes du mouvement données par l'équation (5.4). Ces deux intégrales premières correspondent à l'équation paramétrique d'une sphère de rayon M et d'un ellipsoïde de rayons $\sqrt{2I_1E}$, $\sqrt{2I_2E}$, et $\sqrt{2I_3E}$. Pour une valeur de E fixée, la solution $\vec{M}(t)$ appartient à l'intersection de ces deux surfaces. Comme l'un des moments d'inertie tend vers $+\infty$, l'ellipsoïde d'énergie constante est ici un cylindre elliptique, d'axe $\vec{e}_2$ pour le cas (a) et $\vec{e}_3$ pour le cas (b). Les surfaces sont illustrées sur la figure 5.1 pour les deux configurations.

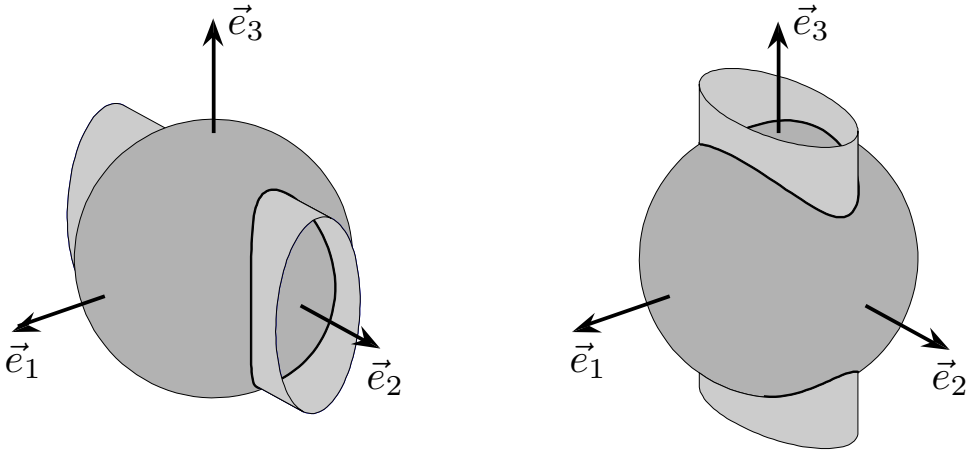

FIGURE 5.1 – Sphère de moment cinétique constant et ellipsoïde d'énergie constante pour la configuration (a) (à gauche), et pour la configuration (b) (à droite). La solution $\vec{M}(t)$ des équations d'Euler est représentée par la courbe noire, qui correspond à l'intersection des deux surfaces.

L'un des moments d'inertie tendant vers $+\infty$, il en reste deux à choisir. L'un des deux peut être fixé à 1 sans perte de généralité. L'autre peut être fixé à $1/k^2$ avec $k \in [0, 1]$. La forme du solide est donc entièrement déterminée par le paramètre k. Le paramètre E est fixé par les conditions initiales de la dynamique de la toupie.

Nous allons utiliser la configuration (a) afin d'étudier les propriétés des champs de contrôle en fonction des paramètres k et E. Nous allons ensuite étudier les propriétés de robustesse d'une inversion de population en fonction de ces deux paramètres.

La configuration (b) est la même que celle utilisée dans le chapitre précédent sur l'effet de la raquette de tennis classique. Nous allons nous en servir pour mettre au point une méthode permettant de réaliser des transformations unitaires, qui nous permettront d'implémenter l'effet de la raquette de tennis quantique.

5.3 Inversion de population

Cette section est une étude des équations de Bloch dans la configuration (a) du tableau 5.1. Dans un premier temps, on donne l'expression des trajectoires classiques obtenues en intégrant les équations d'Euler. Cette analyse nous permettra d'expliciter les champs de contrôle. Les solutions des équations d'Euler ne sont pas démontrées. Celles-ci sont bien connues dans la littérature (voir par exemple [93]). On étudie ensuite les propriétés de ces champs de contrôle en fonction des paramètres E et k. Puis, on les applique pour réaliser une inversion de population. On sélectionne trois trajectoires classiques et on caractérise la durée et l'énergie requise par le transfert pour chaque trajectoire. Enfin, on étudie la robustesse du transfert en fonction des paramètres k et d'un paramètre noté ϵ relié aux conditions initiales de la trajectoire classique considérée.

5.3.1 Intégration des trajectoires

Dans la configuration (a), l'identification des équations de Bloch (Tab. 5.1) avec les équations d'Euler (Eq. (5.1)) conduit à:

$$\Omega(t) = M_1(t)/I_1, \quad \Delta(t) = M_3(t)/I_3, \quad M_2/I_2 = 0. \tag{5.8}$$

L'équation $M_2/I_2 = 0$ impose une contrainte sur le solide fictif de la forme $I_2 \to \infty$. I_1 et I_3 sont des paramètres arbitraires. Sans perdre de généralité, on pose $I_1 = 1$ et $I_3 = 1/k^2$, avec $k \in [0, 1]$. Ainsi, la limite $k = 1$ revient à considérer une toupie symétrique de la forme $I_1 = I_3$, et la limite $k = 0$ un solide de la forme $I_2 = I_3 = +\infty$. Le paramètre k nous permet donc de choisir la forme du solide fictif, ce qui a une influence sur les solutions des équations de Bloch. En substituant $\Omega = M_1$ et $\Delta = k^2 M_3$ dans les équations de Bloch de la configuration (a), on obtient les équations d'Euler suivantes:

$$\dot{M}_1 = k^2 M_2 M_3, \quad \dot{M}_2 = (1 - k^2) M_1 M_3, \quad \dot{M}_3 = -M_1 M_2. \tag{5.9}$$

La sphère de moment cinétique constant correspond ici à la sphère de Bloch. On peut poser $|\vec{M}| = 1$, ce qui n'affecte pas la généralité du problème. Les deux constantes du mouvement sont de la forme:

$$M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 = 1, \quad M_1^2 + k^2 M_3^2 = 2E. \tag{5.10}$$

Elles correspondent, dans le repère $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$, à une sphère de rayon 1 et un cylindre elliptique d'axe $\vec{e}_2$. Ces surfaces sont représentées sur le schéma de gauche de la figure 5.1. Sur ce schéma, l'intersection donne une solution $\vec{M}(t)$ pour une certaine valeur de E. La figure 5.2 montre les solutions $\vec{M}(t)$ pour plusieurs valeurs de E.

Comme dans le cas classique, on distingue trois familles de solutions. Les solutions tournantes apparaissent lorsque le grand rayon du cylindre est supérieur au rayon de la sphère, i.e. $\sqrt{2E}/k > 1$. Les solutions oscillantes apparaissent pour $\sqrt{2E}/k < 1$ et

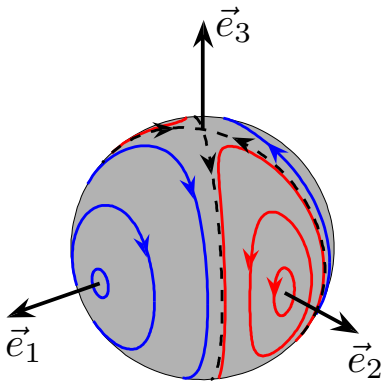

FIGURE 5.2 – Solutions $\vec{M}(t)$ des équations d'Euler dans la configuration (a) pour différentes valeurs de E. Les trajectoires en bleu sont dites *tournantes* et apparaissent lorsque $\sqrt{2E} > k$. Les trajectoires rouges sont dites *oscillantes*, elles apparaissent pour $\sqrt{2E} < k$. La trajectoire en pointillés correspond à la séparatrice qui a lieu pour $\sqrt{2E} = k$.

la séparatrice pour $\sqrt{2E}/k = 1$. E est un paramètre qui permet de choisir l'une de ces trajectoires. On voit que les trajectoires proches de la séparatrice, c'est-à-dire pour $2E \simeq k^2$, sont de bonnes candidates pour l'inversion de population. Toutes les solutions sont périodiques, sauf la séparatrice, qui relie le pôle nord et le pôle sud de la sphère de Bloch en un temps infini. Chaque trajectoire est associée à un champ de contrôle puisque l'on a $\Delta(t) = k^2 M_3(t)$ et $\Omega(t) = M_1(t)$. Nous avons donc trois familles de champs de contrôle qui dépendent des deux paramètres k et E. Le paramètre E change la taille globale du cylindre mais pas sa forme. Il permet de sélectionner une trajectoire de la figure 5.2. Le paramètre k ne modifie que le grand rayon du cylindre donné par $\sqrt{2E}/k$. Il change donc la forme des trajectoires. Lorsque $k \to 1$, le cylindre elliptique devient un cylindre habituel. Les solutions sont alors des cercles centrés sur $\vec{e}_2$ et les séparatrices se regroupent dans le plan $(\vec{e}_1, \vec{e}_3)$. Lorsque $k \to 0$, le cylindre elliptique forme deux plans parallèles, car dans ce cas, le grand rayon du cylindre tend vers l'infini. Les solutions sont alors des cercles centrés sur $\vec{e}_1$ et les séparatrices sont dans le plan $(\vec{e}_2, \vec{e}_3)$. Ces cas limites sont représentés sur la figure 5.3.

Les solutions du problème sont des fonctions elliptiques de Jacobi notées sn, cn et dn [95] et dont les propriétés sont données dans l'annexe A. Afin de ne pas s'encombrer de plusieurs signes, on ne considère que les solutions les plus visibles de la figure 5.2, c'est-à-dire les solutions tournantes telles que $M_1 > 0$, les solutions oscillantes telles que $M_2 > 0$ et la séparatrice telle que $(M_1, M_2) \geq (0, 0)$. Ces solutions sont données dans le tableau 5.2.

Les fonctions elliptiques de Jacobi sont de période $4\,\mathrm{K}(m)$, où $\mathrm{K}(m)$ est une intégrale elliptique de première espèce. Par conséquent, une trajectoire de la figure 5.2 effectue un cycle complet en un temps $T = 4\,\mathrm{K}(m)/\omega$, exceptée la séparatrice qui n'est pas périodique.

Oscillantes $2E < k^2$	Tournantes $2E > k^2$	Séparatrice $2E = k^2$
$M_1 = -\sqrt{2E}\,\mathrm{cn}(\omega t + \rho)$	$M_1 = \sqrt{2E}\,\mathrm{dn}(\omega t + \rho)$	$M_1 = k\,\mathrm{sech}(\omega t + \rho)$
$M_2 = \frac{\omega}{k}\,\mathrm{dn}(\omega t + \rho)$	$M_2 = -\frac{\omega\sqrt{m}}{k}\,\mathrm{cn}(\omega t + \rho)$	$M_2 = \frac{\omega}{k}\,\mathrm{sech}(\omega t + \rho)$
$M_3 = \frac{\sqrt{2E}}{k}\,\mathrm{sn}(\omega t + \rho)$	$M_3 = \frac{\sqrt{2mE}}{k}\,\mathrm{sn}(\omega t + \rho)$	$M_3 = -\tanh(\omega t + \rho)$
$\omega = k\sqrt{1 - 2E}$	$\omega = \sqrt{2E(1 - k^2)}$	$\omega = k\sqrt{1 - k^2}$
$m = \frac{2E(1-k^2)}{k^2(1-2E)}$	$m = \frac{k^2(1-2E)}{2E(1-k^2)}$	$m = 1$

TABLE 5.2 – Solutions $\vec{M}(t)$ des équations de Bloch de la configuration (a).

5.3.2 Champs de contrôle

On rappelle que les composantes du champ de contrôle sont données en fonction des trajectoires classiques $\vec{M}(t)$ par $\Omega = M_1/I_1 = M_1$ et $\Delta = M_3/I_3 = k^2 M_3$. Ceux-ci sont explicités dans le tableau 5.3.

Oscillantes	Tournantes	Séparatrice
$\Omega = -\sqrt{2E}\,\mathrm{cn}(\omega t + \rho)$	$\Omega = \sqrt{2E}\,\mathrm{dn}(\omega t + \rho)$	$\Omega = k\,\mathrm{sech}(\omega t + \rho)$
$\Delta = k\sqrt{2E}\,\mathrm{sn}(\omega t + \rho)$	$\Delta = k\sqrt{2mE}\,\mathrm{sn}(\omega t + \rho)$	$\Delta = -k^2 \tanh(\omega t + \rho)$

TABLE 5.3 – Champs de contrôle associés aux trajectoires classiques de la configuration (a). Les paramètres ω et m sont les mêmes que ceux du tableau 5.2.

Les champs de contrôle dépendent des deux paramètres k et E. Pour que des solutions $\vec{M}(t)$ existent, on doit avoir $\sqrt{2I_1E} \leq 1 \leq \sqrt{2I_2E}$, sans quoi les deux surfaces du schéma de gauche de la figure 5.1 ne s'intersectent pas. On rappelle que $k < 1$. Les propriétés des champs dépendent donc du couple (k, E) avec:

$$k \in [0, 1], \quad 2E \in [0, 1]. \tag{5.11}$$

Analyse à k fixé. Lorsque k est fixé, le paramètre E permet de sélectionner une des trajectoires de la figure 5.2.

Les trajectoires tournantes telles que $2E \in [k^2, 1]$ ont pour cas limite la solution associée au point d'équilibre stable sur l'axe $\vec{e}_1$ et la séparatrice. Le point d'équilibre stable apparaît lorsque $2E = 1$. En substituant cette valeur dans les paramètres des solutions tournantes du tableau 5.2, on obtient $m = 0$ et donc un champ de contrôle de la forme (cf. annexe A):

$$\Omega(t) = 1, \quad \Delta(t) = 0, \tag{5.12}$$

c'est-à-dire un pulse constant le long de $\vec{e}_1$. La séparatrice, elle, correspond au cas où $2E = k^2$. Les champs de contrôle correspondants sont donnés dans la troisième colonne du

tableau 5.3. Cette expression est une autre manière d'écrire la solution d'Allen-Eberly [27], comme nous allons le voir dans un paragraphe consacré à cette solution.

L'autre famille de trajectoires ($2E \in [0, k^2]$) montre, elle aussi, une transition continue entre le point d'équilibre stable le long de $\vec{e}_2$ et la séparatrice. Ce point stable apparaît lorsque $2E = 0$, ce qui correspond à des champs nuls.

Pour k fixé, le paramètre E permet donc de sélectionner un champ de contrôle qui est un compromis entre un pulse constant et un pulse hyperbolique d'Allen-Eberly.

Effet du paramètre k. Comme nous l'avons dit plus haut, le paramètre k modifie la forme du cylindre elliptique et par conséquent la forme des trajectoires classiques $\vec{M}(t)$. Ceci est illustré sur la figure 5.3.

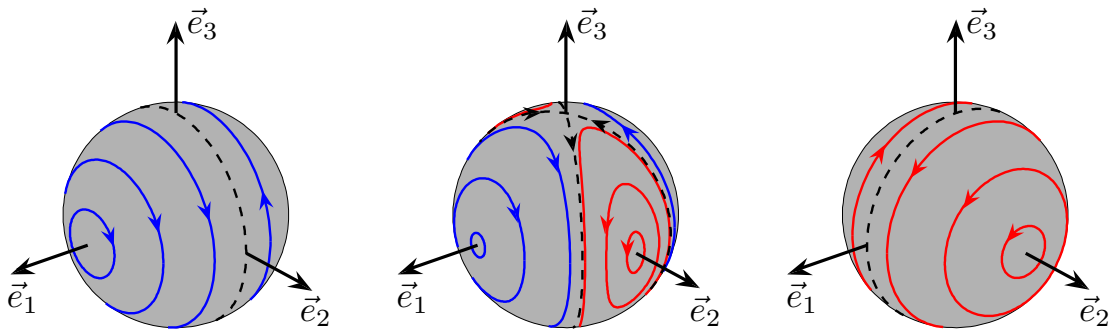

FIGURE 5.3 – Trajectoires classiques $\vec{M}(t)$ dans le repère $\mathcal{S}$ pour $k \to 0$ (à gauche), $k = \sqrt{3}/2$ (au milieu) et $k \to 1$ (à droite). La séparatrice donne la solution d'Allen-Eberly (cf. texte).

Lorsque $k = 0$, les solutions oscillantes disparaissent et les trajectoires tournantes sont de simples cercles centrés sur l'axe $\vec{e}_1$. Les champs de contrôle sont constants et le long de l'axe $\vec{e}_1$. Ils sont donnés par:

$$\Omega(t) = \sqrt{2E}, \quad \Delta(t) = 0. \tag{5.13}$$

Pour $k = 1$, seules les trajectoires oscillantes existent et forment des cercles centrés sur le vecteur $\vec{e}_2$. En substituant $k = 1$ dans les champs oscillants du tableau 5.2, on obtient:

$$\Omega = \sqrt{2E}\cos(t + \rho), \quad \Delta = \sqrt{2E}\sin(t + \rho). \tag{5.14}$$

Pour des trajectoires proches de la séparatrice, c'est-à-dire de sorte que $2E \to k^2$, l'amplitude et l'aire des champs tendent vers l'infini. Ces solutions sont adiabatiques [29]. On peut le montrer en utilisant la condition d'adiabaticité donnée dans l'article [123]. Cette condition est la suivante:

$$\left| \frac{\Omega\dot{\Delta} - \dot{\Omega}\Delta}{(\Omega^2 + \Delta^2)^{\frac{3}{2}}} \right| \ll 1. \tag{5.15}$$

En substituant $\Omega = M_1$ et $\Delta = k^2 M_3$ dans cette expression et en se servant des équations d'Euler (5.9), on peut montrer que l'on a:

$$\left| \frac{\Omega\dot{\Delta} - \dot{\Omega}\Delta}{(\Omega^2 + \Delta^2)^{\frac{3}{2}}} \right| = \left| \frac{2Ek^2 M_2}{(2E - (k^2 - k^4)M_3^2)^{\frac{3}{2}}} \right|. \tag{5.16}$$

En prenant la limite $k \to 1$, la solution oscillante $M_2(t)$ du tableau 5.2 devient $M_2 = \sqrt{1-2E}$. On a alors:

$$\left| \frac{\Omega\dot{\Delta} - \dot{\Omega}\Delta}{(\Omega^2 + \Delta^2)^{\frac{3}{2}}} \right| = \frac{\sqrt{1-2E}}{\sqrt{2E}}. \tag{5.17}$$

Finalement, en choisissant une trajectoire suffisamment proche de la séparatrice telle que $2E \simeq k^2 \to 1$, on en déduit que la condition d'adiabaticité (5.15) est satisfaite.

En résumé, le paramètre k permet de sélectionner des champs entre de simples pulses carrés ($k = 0$) et des pulses circulaires ($k = 1$). De plus, si k est suffisamment proche de 1 et $2E$ de k^2, les champs de contrôle sont adiabatiques. La figure 5.4 illustre toutes les familles de champs dans le plan $(k, \sqrt{2E})$.

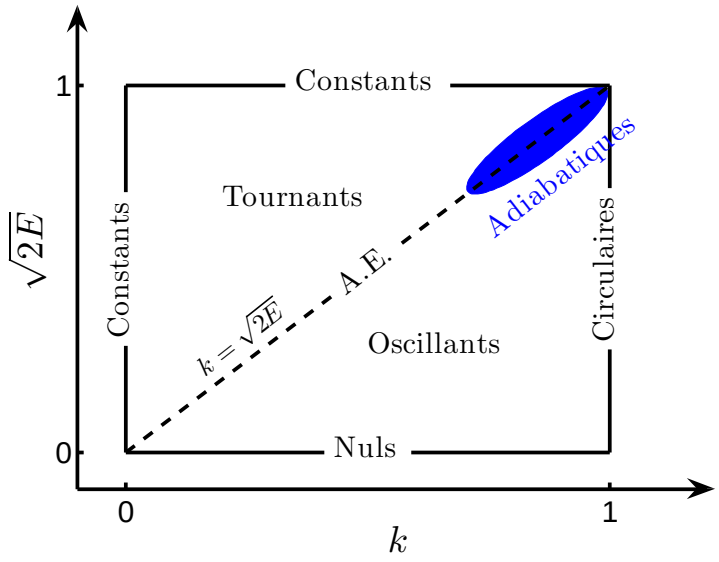

FIGURE 5.4 – Propriétés des champs de contrôle en fonction des paramètres k et E. Les champs constants sont de la forme $(\Omega, \Delta) = (\sqrt{2E}, 0)$. Les champs circulaires sont donnés par $(\Omega, \Delta) = (\sqrt{2E}\cos(\omega t + \rho), \sqrt{2E}\sin(\omega t + \rho))$. La ligne en pointillé est la droite d'équation $\sqrt{2E} = k$, qui correspond à la séparatrice sur laquelle les pulses sont de type Allen-Eberly (A.E. sur la figure). Dans le voisinage de la séparatrice et pour $k \to 1$ (région colorée en bleu), les champs de contrôle ont des propriétés adiabatiques.

Solution d'Allen-Eberly. Le contrôle associé à la séparatrice est équivalent à la solution d'Allen-Eberly, qui est de la forme [27, 28, 29, 30]:

$$\tilde{\Omega} = \frac{1}{\tau}\sqrt{1 + \delta^2\tau^2}\,\mathrm{sech}\left(\frac{\tilde{t}}{\tau} + \rho\right), \quad \tilde{\Delta} = -\delta\tanh\left(\frac{\tilde{t}}{\tau} + \rho\right), \tag{5.18}$$

où τ est une durée de pulse arbitraire et 2δ l'amplitude de $\tilde{\Delta}$. Pour simplifier ces expressions, on introduit les quantités suivantes:

$$t = \Omega_{ref}\tilde{t}, \quad \Omega = \frac{\tilde{\Omega}}{\Omega_{ref}}, \quad \Delta = \frac{\tilde{\Delta}}{\Omega_{ref}}, \quad \Omega_{ref} = \frac{1}{\omega\tau}. \tag{5.19}$$

Les composantes du champ s'écrivent alors sous la forme:

$$\Omega(t) = \omega\sqrt{1+\delta^2\tau^2}\,\mathrm{sech}(\omega t+\rho), \quad \Delta(t) = -\omega\delta\tau\tanh(\omega t+\rho). \tag{5.20}$$

En posant $\delta\tau = k^2/\omega = k/\sqrt{1-k^2}$, on obtient les champs de contrôle associés à la séparatrice, donnés dans la troisième colonne du tableau 5.3.

On suppose qu'à l'instant $t = 0$, le vecteur de Bloch est sur le pôle nord de la sphère, i.e. $M_3(0) = 1$. Au vu de la solution $\vec{M}(t)$ associée à la séparatrice (tableau 5.2), ce point correspond à $\rho \to -\infty$. En un temps $\omega t_f \to +\infty$, le système évolue vers le pôle sud de la sphère le long de la séparatrice. L'aire du pulse est alors donnée par:

$$A = \int_{t=0}^{t=+\infty}\Omega(t)dt = \int_{\omega t=0}^{\omega t=+\infty}\frac{k\,\mathrm{sech}(\omega t+\rho)}{\omega}d(\omega t) = \frac{\pi}{\sqrt{1-k^2}}. \tag{5.21}$$

Si $k = 0$, on obtient un pulse d'aire π le long de $\vec{e}_1$ en forme de sécante hyperbolique, qui inverse naturellement la population du système à deux niveaux. Si $k > 0$, l'aire est supérieure à π, mais le transfert est toujours une inversion de population. Plus k est proche de 1, plus l'aire du pulse est grande et plus les contrôles sont robustes car ils satisfont la condition d'adiabaticité [29]. Remarquons que la figure 5.3 donne une interprétation géométrique de la solution d'Allen-Eberly. Sa forme est liée au fait que la séparatrice relie deux points d'équilibre instable du portrait de phase des équations d'Euler. Lorsque $k \to 1$, la trajectoire et le champ de contrôle sont confondus, i.e. $\vec{M} = \vec{\Omega}$, ce qui explique son comportement adiabatique. Cet aspect a été mis en évidence dans le livre de L. Allen et J. H. Eberly [27]. Cependant, la forme générale, non adiabatique, a été déduite intuitivement. Le portrait de phase de la figure 5.2 donne une explication géométrique de cette solution.

5.3.3 Efficacité et robustesse de l'inversion de population

Dans ce paragraphe, nous allons étudier les propriétés des champs de contrôle associés à trois trajectoires classiques: une tournante, une oscillante et une séparatrice. Les différentes figures 5.2 et 5.3 montrent qu'il est plus naturel de choisir des trajectoires proches de la séparatrice, qui commencent, à l'instant $t = 0$, dans le voisinage du point d'équilibre instable au pôle nord de la sphère. On définit un petit paramètre ϵ qui correspond à l'angle polaire initial de la trajectoire classique choisie. Les trois solutions que nous considérons et le paramètre ϵ sont illustrés sur la figure 5.5. Les paramètres des champs de contrôle associés à chaque trajectoire sont explicités dans le tableau 5.4. La phase ρ est calculée de sorte qu'à l'instant $t = 0$ on ait $M_2 = 0$ pour une solution tournante et $M_1 = 0$ pour

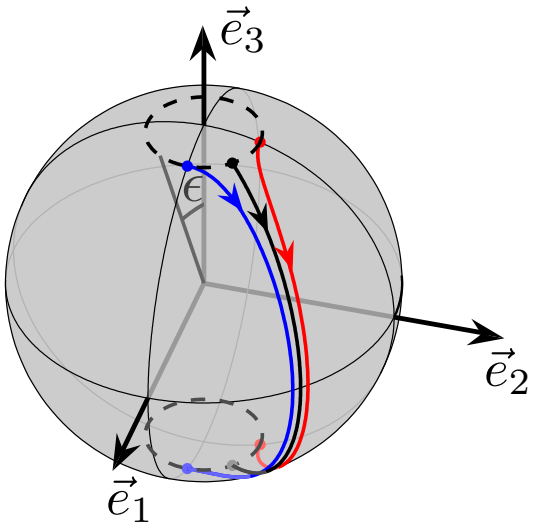

FIGURE 5.5 – Illustration des trois trajectoires classiques considérées pour l'étude de l'inversion de population. La courbe bleue est une solution tournante, la rouge une solution oscillante et la noire une séparatrice. L'angle ϵ est arbitrairement petit. Plus ϵ est petit, plus le transfert est efficace.

une solution oscillante. Dans les deux cas, cela conduit à $\rho = \mathrm{K}(m)$, où $\mathrm{K}(m)$ est une intégrale elliptique complète de première espèce (cf. annexe A). Vu que $M_3(0) = \cos\epsilon$, on peut calculer la valeur du paramètre ρ sur la séparatrice. Le temps de contrôle t_f est calculé de façon à ce que $\vec{M}(t_f)$ soit symétrique à $\vec{M}(0)$ par rapport au plan de l'équateur. Tous ces paramètres sont donnés dans le tableau 5.4 en fonction de ϵ et k.

Oscillation	Rotation	Séparatrice
$2E = k^2\cos^2\epsilon$	$2E = \sin^2\epsilon + k^2\cos^2\epsilon$	$2E = k^2$
$\omega = k\sqrt{1-2E}$	$\omega = \sqrt{2E(1-k^2)}$	$\omega = k\sqrt{1-k^2}$
$m = \frac{2E(1-k^2)}{k^2(1-2E)}$	$m = \frac{k^2(1-2E)}{2E(1-k^2)}$	$m = 1$
$\rho = \mathrm{K}(m)$	$\rho = \mathrm{K}(m)$	$\rho = -\operatorname{arctanh}(\cos\epsilon)$
$\omega t_f = 2\rho$	$\omega t_f = 2\rho$	$\omega t_f = 2\lvert\rho\rvert$.

TABLE 5.4 – Paramètres associés aux trois trajectoires illustrées sur la figure 5.5. Les expressions des champs de contrôle sont donnés dans le tableau 5.3.

Afin d'étudier les propriétés de ces champs de contrôle, nous donnons dans le tableau 5.5 les valeurs de t_f et de l'aire A des champs par des formules simples, obtenues en faisant un développement limité autour de $\epsilon = 0$. A titre d'exemple, calculons l'aire et

la durée de la trajectoire tournante de la figure 5.5. L'aire est donnée par:

$$\begin{aligned} A = \int_0^{t_f} \Omega(t)dt &= \int_0^{\omega t_f} \frac{\sqrt{2E}}{\omega} \,\mathrm{dn}(\omega t + \mathrm{K}(m), m) d(\omega t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-k^2}} \Big[\arcsin[\mathrm{sn}(\omega t + \mathrm{K}(m), m)] \Big]_{\omega t=0}^{\omega t = 2\,\mathrm{K}(m)} \\ &= \frac{\pi}{\sqrt{1-k^2}}. \end{aligned}$$

La durée totale t_f se calcule à l'aide de l'appendice A et en particulier à l'aide d'un développement limité de la fonction $\mathrm{K}(m)$ pour $m \to 1$. Le paramètre m s'exprime sous la forme:

$$m = 1 - \frac{\epsilon^2}{k^2} + o(\epsilon^4). \tag{5.22}$$

L'intégrale elliptique $\mathrm{K}(m)$ devient alors:

$$\begin{aligned} \mathrm{K}(m) &= -\frac{1}{2} \ln\left(\frac{\epsilon^2}{k^2}\right) + \ln(4) + o(\epsilon^2) \\ &= \ln\left(\frac{4}{\epsilon}\right) + o(\epsilon^2). \end{aligned}$$

La valeur de ωt_f étant égale à $2\,\mathrm{K}(m)$, on obtient le résultat du tableau 5.5.

Oscillation	Rotation	Séparatrice
$\omega t_f = 2\ln\left(\frac{4\sqrt{1-k^2}}{\epsilon}\right) + O(\epsilon^2)$ $A = \frac{\pi}{\sqrt{1-k^2}} - \frac{2\epsilon}{1-k^2} + O(\epsilon^3)$	$\omega t_f = 2\ln\left(\frac{4k}{\epsilon}\right) + O(\epsilon^2)$ $A = \frac{\pi}{\sqrt{1-k^2}}$	$\omega t_f = 2\ln\left(\frac{2}{\epsilon}\right) + O(\epsilon^2)$ $A = \frac{\pi}{\sqrt{1-k^2}} - \frac{2\epsilon}{\sqrt{1-k^2}}.$

TABLE 5.5 – Durée t_f et aire A des champs de contrôle associés à chacune des trajectoires de la figure 5.5 dans le voisinage de $\epsilon = 0$.

Ce tableau montre que la durée du transfert et l'aire du champ sont ajustables grâce aux deux paramètres k et ϵ. Pour $k^2 < 1/2$, les champs tournants permettent de réaliser le transfert plus rapidement, mais coûtent plus d'énergie, i.e. leur aire est plus élevée. Pour des solutions plus robustes, plus exactement lorsque $k^2 > 3/4$, les champs associés aux solutions oscillantes permettent un transfert plus rapide et coûtent moins d'énergie que les deux autres familles.

Dans les résultats qui vont suivre, nous allons utiliser le champ de contrôle associé à la trajectoire tournante de la figure 5.5 (trajectoire en bleu), dans le but de réaliser une inversion de population. Une fois les champs calculés, nous intégrerons numériquement le système en partant exactement du pôle nord de la sphère de Bloch à $t = 0$. Notons que les trajectoires classiques de la figure 5.5 ne partent pas exactement du pôle nord de la sphère. Par conséquent, les trajectoires quantiques que nous allons calculer ne sont pas exactement les trajectoires classiques de la figure 5.5, mais elles sont similaires tant que ϵ reste suffisamment petit.

Afin d'analyser la robustesse de ce contrôle, on se concentre sur une trajectoire tournante et on impose $\epsilon = 10^{-2}$. La robustesse est évaluée par rapport à un facteur d'échelle α sur l'amplitude du champ Ω et un terme d'offset δ [51]. Il s'agit d'un procédé standard qui sera utilisé aussi dans le chapitre 6. Plus précisément, on considère un ensemble de $N_\alpha \times N_\delta$ spins, pour lequel chaque spin est associé à un couple de valeurs (α, δ). Cela revient à utiliser un même champ pour contrôler $N_\alpha \times N_\delta$ équations de Bloch qui s'expriment sous la forme:

$$\dot{\vec{M}}_{(\alpha,\delta)} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(t)+\delta & 0 \\ -\Delta(t)-\delta & 0 & (1+\alpha)\Omega(t) \\ 0 & -(1+\alpha)\Omega(t) & 0 \end{pmatrix} \vec{M}_{(\alpha,\delta)}. \tag{5.23}$$

On calcule pour chaque spin la fidélité $J_3 = -M_3(t_f)$ en faisant une propagation numérique partant du pôle nord de la sphère $\vec{M}(0) = {}^t(0,0,1)$ et en utilisant le champ de contrôle associé à la trajectoire tournante de la figure 5.5. On rappelle que les composantes Δ et Ω de ce champ de contrôle sont données dans la deuxième colonne du tableau 5.3 et les paramètres nécessaires dans la deuxième colonne du tableau 5.4. Les résultats sont donnés sur la figure 5.6 pour plusieurs valeurs de k.

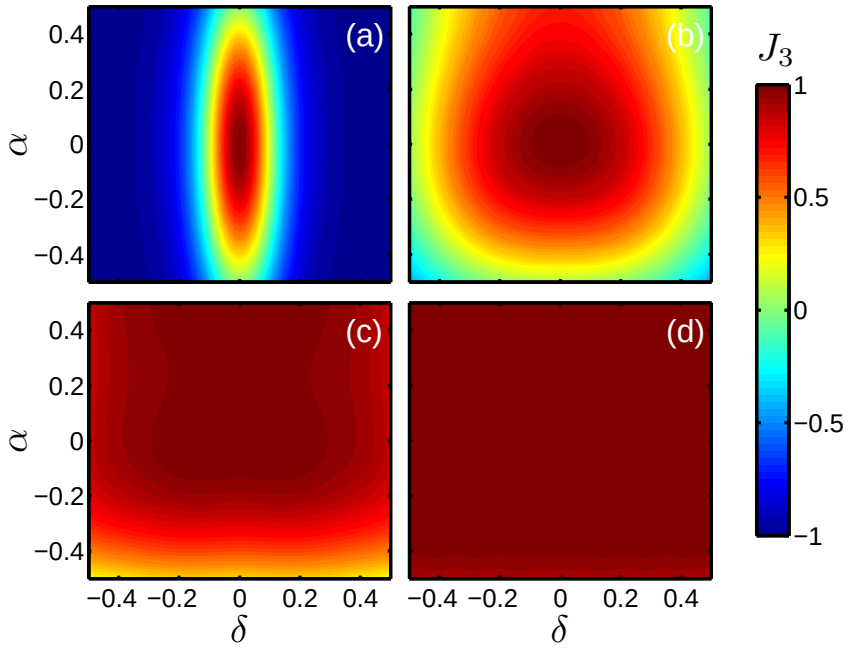

FIGURE 5.6 – Fidélité $J_3 = -M_3(t_f)$ dans le plan (δ, α) de l'inversion de population réalisée avec un champ de contrôle associé à la trajectoire tournante de la figure 5.5. Le paramètre ϵ est fixé à 10^{-2}. La valeur du paramètre k est $k = 0.2$, $k = 0.7$, $k = 0.9$ et $k = 0.99$ pour les figures (a), (b), (c) et (d) respectivement.

Cette figure montre que, comme nous l'avons expliqué, le paramètre k permet de maîtriser la robustesse du transfert. Le paramètre ϵ sert à ajuster le temps de transfert et l'aire du pulse. Nous avons choisi ici un champ associé à une trajectoire tournante. Une

autre famille de contrôles permettrait de privilégier la rapidité du transfert ou l'énergie utilisée.

D'une manière plus générale, on peut étudier la robustesse du transfert dans le plan $(k, \sqrt{2E})$, en gardant les expressions de ρ et t_f du tableau 5.4. Il faut noter que pour des valeurs de (k, E) éloignées de celles de la séparatrice, les trajectoires classiques sont initialement loin du pôle nord de la sphère. Par conséquent, les trajectoires quantiques calculées numériquement, qui sont exactement au point $(0, 0, 1)$ à l'instant initial, sont complètement différentes.

Pour chaque couple $(k, \sqrt{2E})$, on calcule le contrôle correspondant, puis on construit le profil de robustesse dans le plan (δ, α). On en déduit la moyenne suivant la formule:

$$\bar{J}_{(k,E)} = \frac{1}{N_\alpha \times N_\delta} \sum_{n=1}^{N_\alpha} \sum_{m=1}^{N_\delta} J(\delta_m, \alpha_n). \tag{5.24}$$

On considère une plage de valeurs $\delta \in [-0.5, 0.5]$ et $\alpha \in [-0.5, 0.5]$. Le résultat est donné sur la figure 5.7.

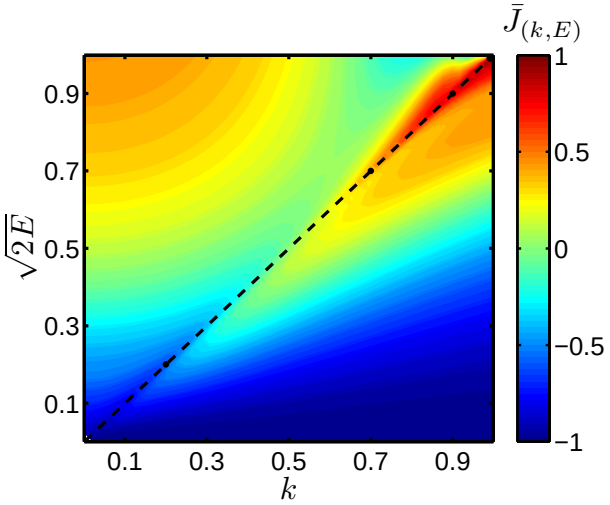

FIGURE 5.7 – Robustesse des champs de contrôle dans le plan $(k, \sqrt{2E})$. Chaque pixel est associé à un champ de contrôle (Ω, Δ). Pour chaque pixel, on calcule $\bar{J}_{(k,E)}$ selon la formule (5.24) sur une plage de valeurs $\delta \in [-0.5, 0.5]$, $\alpha \in [-0.5, 0.5]$. La ligne en pointillés est la droite d'équation $\sqrt{2E} = k$, qui correspond à la séparatrice. Les champs sont oscillants dans la région où $\sqrt{2E} < k$ et tournants dans la région où $\sqrt{2E} > k$.

La structure de cette figure est relativement complexe. A chaque pixel est associé un champ de contrôle, pour lequel on calcule la robustesse par rapport aux inhomogénéités. On observe bien la propriété adiabatique des champs lorsque $k \to 1$, pour des trajectoires proches de la séparatrice. On remarque que le transfert est relativement robuste dans le coin en haut à gauche de cette figure, lorsque k est proche de 0 et $\sqrt{2E}$ proche de 1. On rappelle que pour $k \to 0$, les contrôles sont de la forme $(\Omega, \Delta) = (\sqrt{2E}, 0)$. Dans ce cas, on a $m = 0$ et $\omega = \sqrt{2E}$. Le tableau 5.4 conduit à $\mathrm{K}(m) = \pi/2$ et donc à $t_f = \pi/\sqrt{2E}$.

On a donc un π- pulse standard de durée d'autant plus courte que $\sqrt{2E}$ est proche de 1. Or, si le transfert est de durée plus courte, l'influence de δ sur la dynamique est moindre et la robustesse par rapport à δ augmente. Cela a pour effet d'augmenter la robustesse moyenne $\bar{J}_{(k,E)}$ dans la région $2E \to 1$ et $k \to 0$.

5.4 Transformations unitaires

Dans cette section, nous allons donner une méthode pour construire des transformations unitaires. Nous nous intéressons ici uniquement aux équations de Bloch de la configuration (b). Ce que nous allons voir peut être fait dans l'autre configuration, mais le cas (b) est plus approprié pour nous car les conventions sont les mêmes que celles prisent pour le TRE classique, i.e. $I_1 \leq I_2 \leq I_3$.

5.4.1 Calcul des champs de contrôles

Dans la configuration (b), l'identification des équations de Bloch et des équations d'Euler conduit à poser $\omega_1 = M_1/I_1$, $\Omega_2 = M_2/I_2$ et $\Omega_3 = 0$, ce qui impose une contrainte de la forme $I_3 \to \infty$. On pose $I_1 = 1$ et $I_2 = 1/k^2$. Ainsi, on obtient les équations d'Euler suivantes:

$$\dot{M}_1 = -k^2 M_2 M_3, \quad \dot{M}_2 = M_1 M_3, \quad \dot{M}_3 = (1-k^2) M_1 M_2. \tag{5.25}$$

Ce système s'intègre à l'aide des deux constantes du mouvement suivantes:

$$2E = L_1^2 + k^2 L_2^2, \quad 1 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2. \tag{5.26}$$

Comme nous l'avons vu dans la section 5.2, l'ellipsoïde d'énergie constante est un cylindre elliptique d'axe $\vec{e}_3$, qui est représenté sur le schéma de droite de la figure 5.1. En traçant les solutions classiques $\vec{M}(t)$ pour plusieurs valeurs de E, on obtient les trajectoires de la figure 5.8.

On se concentre sur les solutions tournantes telles que $M_1 > 0$, oscillantes telles que $M_3 > 0$ et sur la séparatrice telle que $(M_1 > 0, M_3 > 0)$, c'est-à-dire les solutions les plus visibles de la figure 5.8. Les champs de contrôle correspondants sont donnés dans le tableau 5.6. Les solutions $\vec{M}(t)$ ont des expressions similaires à celles de la section précédente, nous ne les donnons pas ici. On remarque que la séparatrice relie cette fois les points $\vec{M} = {}^t(0,1,0)$ et $\vec{M} = {}^t(0,-1,0)$. Dans l'article [122] consacré à ce sujet, nous avons montré que ce transfert particulier a des propriétés de robustesse similaires à l'inversion dans la configuration (a). Il se trouve que comme précédemment, les trajectoires dans le voisinage de la séparatrice donnent des champs de contrôle qui sont d'autant plus robustes que k est proche de 1. Ici, nous allons exclusivement nous concentrer sur l'étude de transformations unitaires.

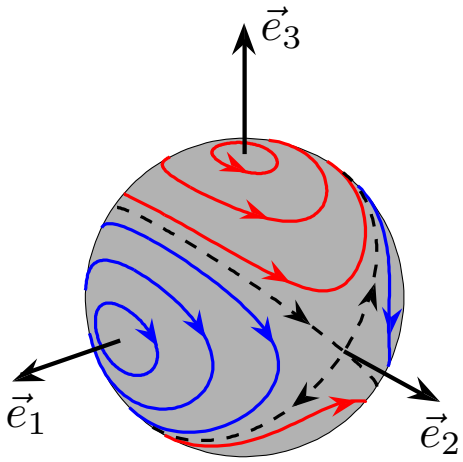

FIGURE 5.8 – Trajectoires $\vec{M}(t)$ solutions des équations d'Euler dans la configuration (b). Les trajectoires en rouge sont oscillantes ($2E < k^2$), celles en bleu sont tournantes ($2E > k^2$) et celles en pointillés correspondent aux séparatrices.

Oscillants	Tournants	Séparatrices
$\omega_1 = \sqrt{2E}\ \mathrm{cn}(\omega t + \rho, m)$	$\omega_1 = \sqrt{2E}\ \mathrm{dn}(\omega t + \rho, m)$	$\omega_1 = k\,\mathrm{sech}(\omega t + \rho)$
$\omega_2 = k\sqrt{2E}\ \mathrm{sn}(\omega t + \rho, m)$	$\omega_2 = k\sqrt{2mE}\ \mathrm{sn}(\omega t + \rho, m)$	$\omega_2 = k^2 \tanh(\omega t + \rho)$
$\omega = k\sqrt{1-2E}$	$\omega = \sqrt{2E(1-k^2)}$	$\omega = k\sqrt{1-k^2}$
$m = \frac{2E(1-k^2)}{k^2(1-2E)}$	$m = \frac{k^2(1-2E)}{2E(1-k^2)}$	$m = 1$

TABLE 5.6 – Champs de contrôle dans la configuration (b).

5.4.2 Phase globale

Le vecteur de Bloch $\vec{M}$ ne permet pas de déterminer la phase globale du système quantique. Pour la calculer, nous avons besoin d'introduire les angles d'Euler, ce qui complète l'analogie avec la dynamique d'un solide en rotation libre. On rappelle que le repère $\mathcal{S} \equiv (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ est attaché au solide fictif. On définit le repère $\mathcal{L} \equiv (\vec{X}, \vec{Y}, \vec{M})$ attaché au laboratoire et dont l'un des axes est colinéaire au moment cinétique $\vec{M}$ du solide. On définit les trois angles d'Euler comme dans le chapitre précédent sur le TRE classique. Les deux repères et les angles sont représentés sur la figure 5.9.

Les composantes du moment cinétique dans le repère $\mathcal{S}$ s'expriment en fonction de θ et ψ suivant les relations:

$$M_1 = \cos\theta, \quad M_2 = -\sin\theta\cos\psi, \quad M_3 = \sin\theta\sin\psi. \tag{5.27}$$

La fonction d'onde du système quantique peut être paramétrée par les angles d'Euler de la manière suivante:

$$|\zeta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\frac{\psi}{2}} + i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\psi}{2}} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\frac{\psi}{2}} - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\psi}{2}} \end{pmatrix} e^{i\frac{\phi}{2}}. \tag{5.28}$$

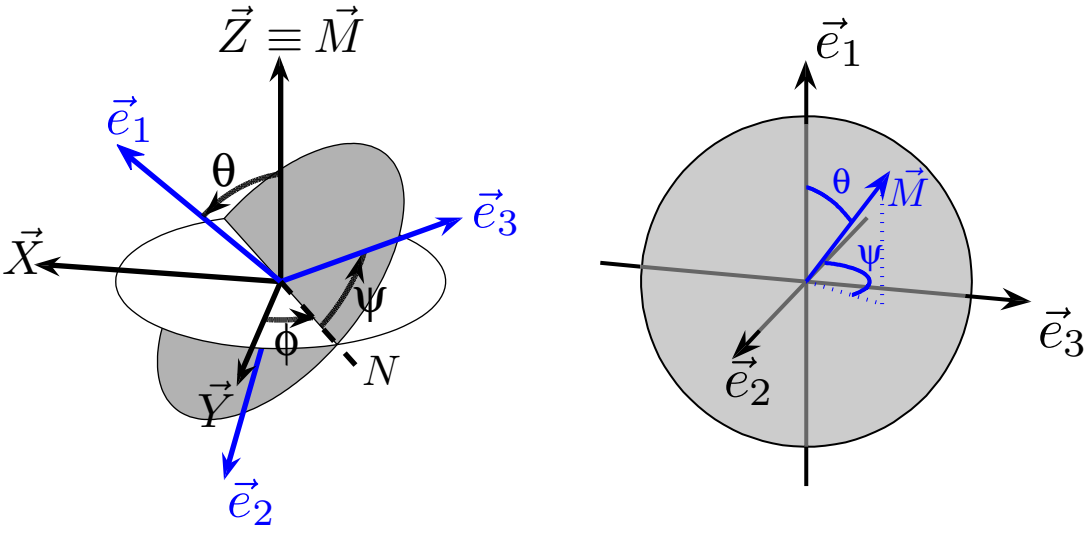

FIGURE 5.9 – *A gauche:* Repères $\mathcal{S} \equiv (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ et $\mathcal{L} \equiv (\vec{X}, \vec{Y}, \vec{M})$ attachés respectivement à la toupie et au laboratoire. Les angles θ et ψ permettent de localiser le vecteur $\vec{M}$ dans le repère $\mathcal{S}$, et ϕ donne la phase globale du système (cf. texte). *A droite:* Moment cinétique $\vec{M}$ repéré par les deux angles θ et ψ dans le repère $\mathcal{S}$. Le vecteur $\vec{e}_1$ est dirigé verticalement pour avoir une vision plus claire des angles θ et ψ. On gardera cette convention pour les prochaines figures.

On peut le vérifier en se servant des formules $M_1 = \langle\zeta|\sigma_x|\zeta\rangle$, $M_2 = \langle\zeta|\sigma_y|\zeta\rangle$ et $M_3 = \langle\zeta|\sigma_z|\zeta\rangle$, où les σ_k sont les matrices de Pauli. Notons que ϕ est une phase globale qui décrit la rotation des axes $\vec{X}$ et $\vec{Y}$ autour du vecteur $\vec{M}$. En appliquant l'équation de Schrödinger $i\hbar\partial_t |\zeta\rangle = H |\zeta\rangle$, avec H l'opérateur Hamiltonien donné par l'équation (5.7), on peut montrer que la dynamique des angles d'Euler est gouvernée par le système suivant:

$$\begin{cases} \dot{\theta} = \omega_2 \sin\psi \\ \dot{\phi} = -\omega_2 \frac{\cos\psi}{\sin\theta} \\ \dot{\psi} = \omega_1 + \omega_2 \frac{\cos\psi}{\tan\theta}. \end{cases} \tag{5.29}$$

Nous pouvons aussi démontrer ces équations en utilisant la méthode décrite dans la section 2.6 du chapitre 2. Rappelons-nous que les champs de contrôle sont donnés par $\omega_1 = M_1$ et $\omega_2 = k^2 M_2$. En utilisant les équations (5.27), le système s'écrit finalement:

$$\begin{cases} \dot{\theta} = -k^2 \sin\theta \sin\psi \cos\psi \\ \dot{\phi} = k^2 \cos^2\psi \\ \dot{\psi} = \cos\theta(1 - k^2 \cos^2\psi). \end{cases} \tag{5.30}$$

En contrôlant ces trois angles, nous sommes donc capable de contrôler la dynamique du repère $\mathcal{L}$ (ou $\mathcal{S}$). Il est important de noter que la dynamique de notre système quantique

est gouvernée par le système (5.29), qui est plus général que le système classique donné par (5.30). Le système (5.30) va nous permettre de calculer des champs de contrôle, que nous injecterons ensuite dans le système (5.29). Chaque champ calculé est associé à un ensemble de conditions initiales dans le système classique. Lorsque l'on insère ces champs dans le système quantique alors les trajectoires $\vec{M}(t)$ sont identiques uniquement si l'on choisit les mêmes conditions initiales. Cependant, nous allons voir que les transformations unitaires ne sont pas affectées par cette différence entre les deux systèmes.

5.4.3 Portes quantiques

Nous avons vu dans la section 1.3 du chapitre 1 que les portes quantiques à un qubit peuvent être représentées par la rotation d'un repère sur la sphère de Bloch. Ces portes sont des transformations unitaires, dans le sens où elles correspondent à des rotations autour d'un axe de la sphère de Bloch. Par exemple, nous avons vu qu'une porte NOT correspond à une rotation d'angle π autour de l'axe $\vec{e}_1$ ou $\vec{e}_2$ de la sphère de Bloch. Cette rotation ne dépend pas des conditions initiales du système, mais seulement des champs de contrôle. Nous allons donner un moyen de calculer une porte associée à une solution du système d'Euler. Ainsi, le champ de contrôle associé va permettre de réaliser une porte dans le système quantique.

Comme nous l'avons vu dans la section 2.6 du chapitre 2, les matrices de rotation permettent d'exprimer les coordonnées du repère $\mathcal{S}$ dans le repère $\mathcal{L}$ et réciproquement en prenant la transposée. On définit les matrices suivantes:

$$G_\psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\psi & \sin\psi \\ 0 & -\sin\psi & \cos\psi \end{pmatrix},\ G_\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ G_\phi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & \sin\phi \\ 0 & -\sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}. \quad (5.31)$$

La matrice qui nous intéresse est $G = G_\psi G_\theta G_\phi$, car elle donne directement les composantes du repère $\mathcal{L}$ dans le repère $\mathcal{S}$ associé à la boule de Bloch, i.e:

$$G(t) = \begin{pmatrix} M_1(t) & X_1(t) & Y_1(t) \\ M_2(t) & X_2(t) & Y_2(t) \\ M_3(t) & X_3(t) & Y_3(t) \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

La connaissance des angles d'Euler nous donne donc chacune des composantes de cette matrice. Un transfert sur $SO(3)$ est donné par $G(t_f) = R_f \cdot G(0)$, où R_f est le propagateur à l'instant t_f. Par conséquent, le propagateur unitaire R_f s'exprime de la façon suivante:

$$R_f = G(t_f) \cdot {}^tG(0). \quad (5.33)$$

Pour une trajectoire quelconque, la forme explicite de R_f en fonction des angles d'Euler est compliquée et n'apporte pas beaucoup d'informations. Cependant, pour certaines trajectoires particulières, R_f se simplifie considérablement. On considère des trajectoires proches de la séparatrice qui commencent dans le voisinage du point d'équilibre instable

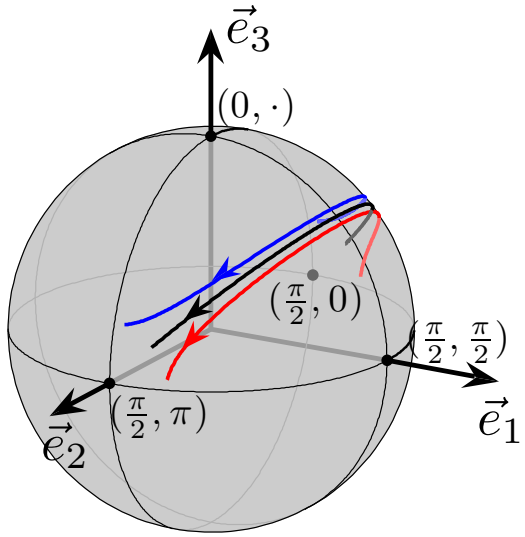

FIGURE 5.10 – Type de trajectoires classiques $\vec{M}(t)$ choisies pour réaliser des transformations unitaires. La trajectoire en bleu est une trajectoire tournante, celle en rouge est une trajectoire oscillante et celle en noire une séparatrice. Les nombres entre parenthèses sont les valeurs du couple (θ,ψ) aux points noirs correspondants. Les trajectoires commencent dans le voisinage du point $(\theta,\psi)=(\pi/2,0)$ et sont symétriques par rapport au plan $(\vec{e}_1,\vec{e}_3)$.

$\vec{M}=(0,-1,0)$ et qui sont symétriques par rapport au plan $(\vec{e}_1,\vec{e}_3)$. Ce type de trajectoire est illustré sur la figure 5.10. Ces conditions s'écrivent pour les angles d'Euler:

$$\begin{array}{ll}\theta(0)\simeq\frac{\pi}{2} & \theta(t_f)=\theta(0)\\ \psi(0)\simeq 0 & \psi(t_f)=\pi-\psi(0),\end{array}, \tag{5.34}$$

et la phase globale ϕ est libre. Dans ces conditions, le propagateur R_f s'écrit sous la forme:

$$R_f=\begin{pmatrix}\cos(\Delta\phi) & 0 & \sin(\Delta\phi)\\ 0 & -1 & 0\\ \sin(\Delta\phi) & 0 & -\cos(\Delta\phi)\end{pmatrix}, \tag{5.35}$$

avec $\Delta\phi=\phi(t_f)-\phi(0)$. Remarquons que pour un état quelconque $\vec{M}=(M_1,M_2,M_3)$, cette rotation est donnée par:

$$\begin{cases}M_1(0)\to M_1(t_f)=M_1(0)\cos(\Delta\phi)+M_3(0)\sin(\Delta\phi),\\ M_2(0)\to M_2(t_f)=-M_2(0),\\ M_3(0)\to M_3(t_f)=M_1(0)\sin(\Delta\phi)-M_3(0)\cos(\Delta\phi),\end{cases} \tag{5.36}$$

soit une inversion de M_2 et une rotation d'angle $\Delta\phi$ autour de l'axe $\vec{e}_2$ de la sphère de Bloch. On peut déterminer à quoi correspond cette transformation dans le groupe $SU(2)$ en se servant des outils introduits dans la section 1.3 du chapitre 1. Les matrices U_ψ, U_θ

et U_ϕ du groupe $SU(2)$ sont associées aux trois matrices de rotation de l'équation (5.31). Elles s'expriment en fonction des angles d'Euler sous la forme:

$$U_\psi = \pm \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) & -i\sin\left(\frac{\psi}{2}\right) \\ -i\sin\left(\frac{\psi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\psi}{2}\right) \end{pmatrix},\ U_\theta = \pm \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix},\ U_\phi = \pm \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) & -i\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ -i\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix}. \tag{5.37}$$

On peut donc reprendre la même démarche qu'avec les matrices de rotation. Le propagateur $U(t)$ peut s'écrire sous la forme:

$$U(t) = \pm U_\psi U_\theta U_\phi. \tag{5.38}$$

La porte réalisée est alors donnée par:

$$U_{f,SU(2)} = U(t_f) \cdot^\dagger U(t_0), \tag{5.39}$$

où l'exposant † désigne la matrice adjointe. En explicitant cette matrice, puis en substituant les conditions (5.34), on obtient:

$$U_{f,SU(2)} = \pm \begin{pmatrix} \sin\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) & -\cos\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) & \sin\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) \end{pmatrix}. \tag{5.40}$$

Cette opération réalise donc une porte quantique de la forme $|\zeta(t_f)\rangle = U_{f,SU(2)}\,|\zeta(0)\rangle$.

5.4.4 Effet de la raquette de tennis quantique

Méthodologie

On rappelle que toutes les conventions que nous avons prises sont les mêmes que dans le chapitre précédent sur le TRE classique. Si l'on considère le solide comme une raquette, alors le manche se situe le long du vecteur $\vec{e}_1$, le vecteur $\vec{e}_2$ est perpendiculaire au manche et dans le plan du tamis et le vecteur $\vec{e}_3$ est perpendiculaire au tamis. Les moments d'inertie principaux d'une raquette vérifient $I_1 \leq I_2 \leq I_3$, ce qui est bien le cas ici. Le choix des angles d'Euler est identique à celui que nous avions fait dans le chapitre sur le TRE classique. On rappelle que l'effet de la raquette de tennis réalise la transformation suivante:

$$\begin{array}{cc} t = t_0 & t = t_f \\ \begin{cases} \vec{e}_1 \simeq \vec{X} \\ \vec{e}_2 \simeq -\vec{M} \\ \vec{e}_3 \simeq \vec{Y} \end{cases} & \begin{cases} \vec{e}_1 \simeq \vec{X} \\ \vec{e}_2 \simeq \vec{M} \\ \vec{e}_3 \simeq -\vec{Y}. \end{cases} \end{array} \tag{5.41}$$

Pour les angles d'Euler, cette transformation s'exprime sous la forme:

$$\begin{aligned} &\theta(0) \simeq \tfrac{\pi}{2}, \quad \theta(t_f) = \theta(0), \\ &\psi(0) \simeq 0, \quad \psi(t_f) = \pi - \psi(0), \\ &\phi(0) = 0, \quad \phi(t_f) = 2\pi. \end{aligned} \tag{5.42}$$

Les conditions sur θ et ψ sont les mêmes que celles données dans l'équation (5.34). Par conséquent, les trajectoires classiques $\vec{M}(t)$ nécessaires au TRE sont du même type que sur la figure 5.10. Le propagateur U_f est de la même forme que dans l'équation (5.35). La contrainte sur $\phi(t_f) - \phi(0) = 2\pi$ permet de le simplifier, car en substituant $\Delta\phi = 2\pi$ dans l'équation (5.35), on obtient:

$$R_{TRE} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{5.43}$$

qui correspond à une rotation de π autour de l'axe $\vec{e}_1$ de la boule de Bloch, soit la transformation réalisée par un π- pulse standard. Remarquons qu'en substituant $\Delta\phi = 2\pi$ dans la matrice d'évolution (5.40), on obtient:

$$U_{TRE,SU(2)} = \pm \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{5.44}$$

On remarque que cela implique qu'il faut appliquer quatre TRE dans le groupe $SU(2)$ pour revenir à l'état initial, c'est à dire:

$$|\lambda(t_f)\rangle = \left(U_{TRE,SU(2)}\right)^4 |\lambda(0)\rangle \Rightarrow |\lambda(t_f)\rangle = |\lambda(0)\rangle\,, \tag{5.45}$$

alors qu'il suffit de deux TRE sur le groupe $SO(3)$. On sait que cette transformation est réalisée par une trajectoire classique du même type que sur la figure 5.10. Cependant, seulement certaines d'entre elles réalisent un TRE. En effet, ces trajectoires ne nous assurent uniquement que les conditions (5.34) sur les angles θ et ψ sont satisfaites, mais ne nous disent rien sur la phase ϕ, qui n'est pas visible sur la figure 5.10. Or, pour réaliser le TRE, l'angle ϕ doit satisfaire la condition supplémentaire $\Delta\phi = 2\pi$. Par conséquent, seulement certains couples de conditions initiales (θ, ψ) sont intéressants. Mais ces conditions initiales ne sont pas faciles à calculer, car elles nécessitent de résoudre l'équation $\Delta\phi = 2\pi$, c'est-à-dire de connaître la fonction $\phi(t)$. On peut montrer, en intégrant (5.30), que $\phi(t)$ est donné par une intégrale elliptique de troisième espèce. Pour obtenir une condition plus simple, on peut se servir du résultat obtenu dans le chapitre précédent sur l'effet de la raquette de tennis classique, à savoir le théorème (4.24). Ce théorème donne directement la validité du TRE en fonction des conditions initiales et des propriétés du solide.

Théorème de la raquette de Tennis quantique

Dans le chapitre précédent, nous avons défini des paramètres a et b en fonction des moments d'inertie principaux du solide, ainsi qu'un paramètre γ qui dépend de E et M (Eq. (4.9)). Nous sommes ici dans un cas particulier où $I_1 = 1$, $I_2 = 1/k^2$, $I_3 = +\infty$ et $M = 1$. Les paramètres a, b et γ s'écrivent ici sous la forme $a = 1/k^2 - 1$, $b = 1$, $\gamma = 2E/k^2 - 1$. On rappelle que le théorème est valide pour des solides pour lesquels

le produit ab est suffisamment grand et pour des trajectoires proches de la séparatrice, c'est-à-dire de telle sorte que γ soit proche de 0. Ces conditions se traduisent ici par les contraintes suivantes: k ne doit pas être trop proche de 1 et $2E \sim k^2$. On rappelle que le théorème (4.24) s'applique à des trajectoires symétriques de la forme:

$$\psi(0) = \epsilon \longrightarrow \psi(t_f) = \pi - \epsilon. \tag{5.46}$$

Pour une rotation $\Delta\phi = 2\pi$ du manche de la raquette dans l'espace, la raquette effectue un flip autour de son manche qui vaut:

$$\Delta\psi|_{\Delta\phi=2\pi} = \pi - 2\epsilon. \tag{5.47}$$

L'égalité $\epsilon = 0$ signifie que la raquette effectue un flip d'exactement π autour de son manche quand celui-ci effectue une rotation dans l'espace. Le théorème est donné ci-dessous.

Théorème 5.4.1 *Si k n'est pas trop proche de 1, et pour une trajectoire proche de la séparatrice de telle sorte que $2E \sim k^2$, le paramètre ϵ est donné par:*

$$\epsilon = \epsilon_s - \frac{2E - k^2}{4\epsilon_s} + O([2E - k^2]^2), \tag{5.48}$$

où ϵ_s est un paramètre dépendant uniquement de k. Il est donné par:

$$\epsilon_s = 2\sqrt{1-k^2}e^{-\sqrt{1-k^2}\left(1+\frac{\pi}{k}\right)} + O\left(e^{-2\frac{\sqrt{1-k^2}\pi}{k}}\right). \tag{5.49}$$

Les conditions initiales nécessaires pour effectuer un TRE sont implicitement données par l'équation (5.48) à travers le paramètre E. On rappelle que $2E$ est donné par $2E = M_1^2 + k^2 M_2^2$ et les composantes de $\vec{M}$ s'expriment en fonction des deux angles θ et ψ sous la forme $M_1 = \cos\theta$ et $M_2 = -\sin\theta\cos\psi$. $2E$ étant une constante du mouvement, il ne dépend que de $\theta(0)$ et $\psi(0) = \epsilon$. Par conséquent, pour avoir un TRE, les conditions initiales doivent satisfaire l'équation suivante:

$$\cos^2\theta(0) + k^2\sin^2\theta(0)\cos^2\epsilon = k^2 - 4\epsilon_s(\epsilon - \epsilon_s). \tag{5.50}$$

La valeur de $\epsilon = \psi(0)$ peut être choisie arbitrairement, à condition d'être petite, ce qui permet d'en déduire la valeur de $\theta(0)$. Une fois ces conditions initiales calculées, on connaît la valeur de E et donc les champs de contrôle.

Calcul des conditions initiales

On considère des trajectoires particulières, pour lesquelles $\psi(0) = \epsilon = 0$. Seules des trajectoires tournantes peuvent satisfaire cette contrainte. De plus, étant donné que nous considérons des trajectoires symétriques, on a $\psi(t_f) = \pi$, ce qui implique que $M_3(0) = M_3(t_f) = 0$. La trajectoire étant un demi-cycle, sa durée est la moitié de la période des fonctions de Jacobi. Par conséquent, les paramètres ρ et t_f sont donnés par:

$$\rho = -\,\mathrm{K}(m), \quad t_f = 2\,\mathrm{K}(m)/\omega. \tag{5.51}$$

L'angle $\theta(0)$ se calcule en résolvant l'équation (5.50) avec $\epsilon = 0$. Le paramètre ϵ_s étant proche de 0, on obtient:

$$\theta(0) = \frac{\pi}{2} - \frac{2\epsilon_s}{\sqrt{1-k^2}}. \tag{5.52}$$

Cependant, le théorème de la raquette de tennis étant une formule asymptotique, la formule (5.52) n'est pas exacte et implique que le TRE correspondant n'est pas parfait. Pour l'application expérimentale que nous avons réalisée, les conditions initiales ont été calculées numériquement. Celles-ci sont décrites dans le paragraphe suivant.

5.4.5 Réalisation expérimentale

Champs de contrôle

L'effet de la raquette de tennis quantique a été implémenté expérimentalement pour une valeur de $k = 0.7$. La valeur initiale $\theta(0)$ est calculée numériquement, afin d'avoir un TRE le plus précis possible. Pour calculer le paramètre $\theta(0)$, on procède de la façon suivante: après avoir fixé k, on intègre numériquement le système (5.30) en utilisant un algorithme de Runge-Kutta [124], à partir de l'état initial $(\theta(0), \psi(0), \phi(0)) = (\theta(0), 0, 0)$, pendant un temps $t_f = 2\,\mathrm{K}(m)/\omega$ (ω et m étant eux-même fixés par les conditions initiales). Ceci implique nécessairement que $\psi(t_f) = \pi$. On calcule la valeur de $\theta(0)$ pour laquelle $\phi(t_f) = 2\pi$, c'est-à-dire pour laquelle le TRE est réalisé, en utilisant un algorithme de T. Dekker [125]. Les conditions initiales de la trajectoire classique sont données par:

$$\psi(0) = 0, \quad \theta(0) = \frac{\pi}{2} - 5.175 \cdot 10^{-2}. \tag{5.53}$$

La valeur de E associée à ces conditions initiales est donnée par $E = 0.245682$. Les autres paramètres s'obtiennent grâce aux formules suivantes:

$$\omega = \sqrt{2E(1-k^2)}, \quad m = \frac{k^2(1-2E)}{2E(1-k^2)}, \quad \rho = \mathrm{K}(m), \quad t_f = \frac{2\,\mathrm{K}(m)}{\omega}. \tag{5.54}$$

Les champs de contrôle sont de la forme:

$$\omega_1 = \sqrt{2E}\,\mathrm{dn}(\omega t + \rho, m), \quad \omega_2 = k\sqrt{2mE}\,\mathrm{sn}(\omega t + \rho, m). \tag{5.55}$$

Dans ce travail, les équations de Bloch ont été choisies suivant la convention suivante:

$$\dot{\vec{M}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \omega_2 \\ 0 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} \vec{M}. \tag{5.56}$$

Le transfert dans les coordonnées de Bloch est de la forme $(0,1,0) \to (0,-1,0)$, ce qui correspond à une trajectoire similaire qu'auparavant mais prise dans le sens opposé. Ce point est dû à la convention prise pour les équations de Bloch. Comme nous sommes dans le cas quantique, la porte réalisée ne dépend que des champs de contrôle et pas des

conditions initiales. On peut donc considérer qu'à l'instant $t = 0$, les deux repères sont confondus, ce qu'on ne peut pas faire dans le cas classique. On choisit des conditions initiales de la forme:

$$\vec{X}(0) = \vec{e}_3, \quad \vec{Y}(0) = \vec{e}_1, \quad \vec{M}(0) = \vec{e}_2. \tag{5.57}$$

Le TRE quantique correspondant est représenté sur la figure 5.11.

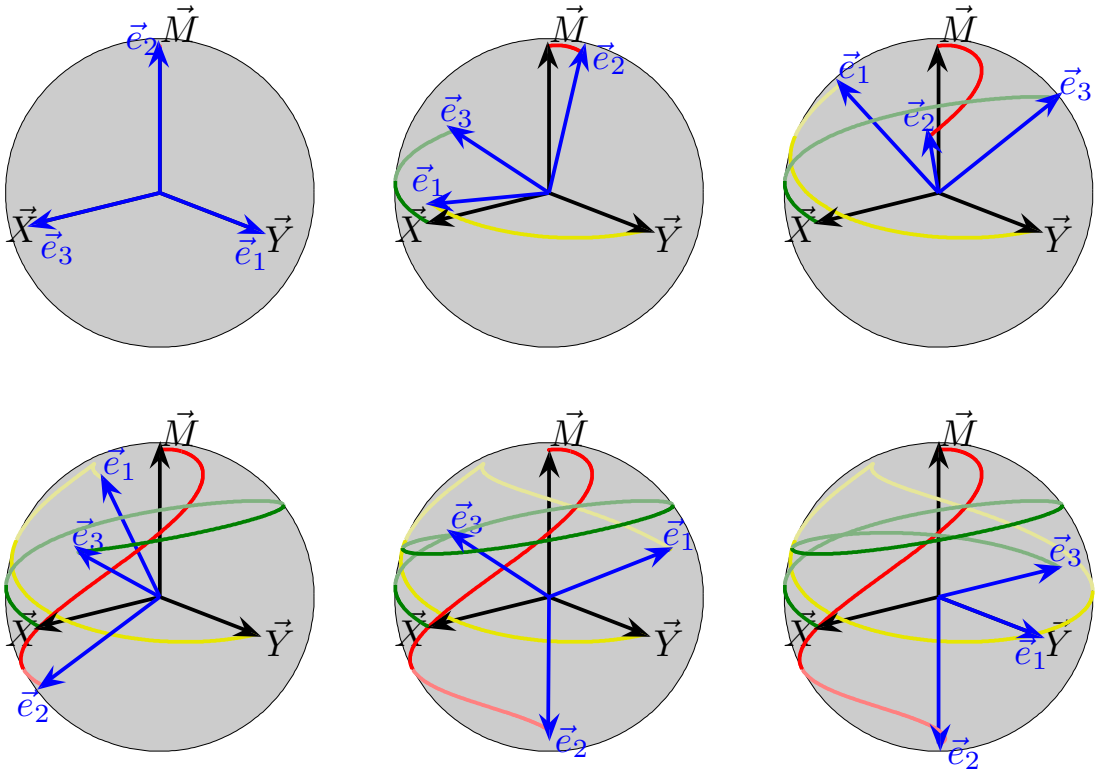

FIGURE 5.11 – Effet de la raquette de tennis quantique implémenté expérimentalement. La figure en haut à gauche représente le système à l'instant $t = 0$, celle en bas à droite correspond à $t = t_f$. Le repère $\mathcal{S} = (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ (en bleu) est attaché à la boule de Bloch ou à la raquette fictive. Le manche de la raquette est colinéaire au vecteur $\vec{e}_1$, le vecteur $\vec{e}_2$ est perpendiculaire au manche, dans le plan du tamis, et le vecteur $\vec{e}_3$ est perpendiculaire au tamis. La trajectoire en jaune représente la dynamique de l'axe $\vec{e}_1(t)$ (manche de la raquette), celle en rouge la dynamique de $\vec{e}_2$ et celle en vert la dynamique de l'axe $\vec{e}_3$.

Unités

Les unités considérées jusqu'à présent sont normalisées. Afin d'avoir des champs de contrôle dans les unités physiques, il faut introduire une valeur de référence $\Omega_{\text{ref}} = 2\pi\nu_{\text{ref}}$ avec ν_{ref} en hertz. On renormalise les champs suivant les formules:

$$\Omega_{1,\text{exp}} = \Omega_{\text{ref}}\omega_1, \quad \Omega_{2,\text{exp}} = \Omega_{\text{ref}}\omega_2, \quad t_{\text{exp}} = \frac{t}{\Omega_{\text{ref}}}. \tag{5.58}$$

La valeur de Ω_{ref} est fixée à 10^4 rad.s^{-1}. La durée totale du transfert est donc de $t_{f,\text{exp}} = 1.5965$ ms et la fréquence maximum atteinte par le champ de contrôle est donnée par $\nu_{\max} = \Omega_{\text{ref}}/2\pi \max(\omega_1^2 + \omega_2^2) = \Omega_{\text{ref}}\sqrt{2E}/2\pi = 1115.6$ Hz. Les composantes du champ de contrôle sont montrées sur la figure 5.12.

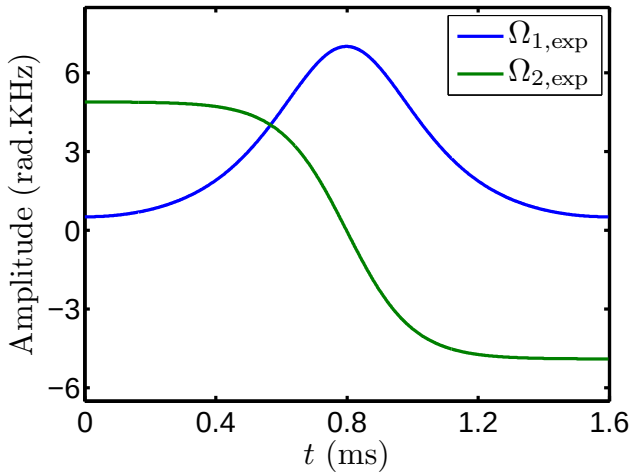

FIGURE 5.12 – Champ de contrôle expérimental pour implémenter un TRE.

Résultats

Cette expérience a été menée en collaboration avec D. Leiner, étudiant en thèse dans le groupe de S. J. Glaser à l'Université Technique de Munich. Elle a été réalisée avec un spectromètre Bruker 600 MHz, pour contrôler les spins des protons de la molécule H_2O diluée dans de l'oxyde de deutérium D_2O a 99%. A température ambiante (298 K), le paramètre de relaxation longitudinale est donné par $T_1 = 1.815\,s \gg t_f$. Son effet est donc négligeable compte tenu du temps de contrôle. Pour connaître les composantes de $\vec{M}$ en fonction du temps, le processus de contrôle est interrompu à différents instants au cours de la dynamique, puis mesuré. Avant l'application du pulse TRE, le système est excité par une impulsion $\pi/2$ afin d'envoyer le vecteur $\vec{M}(t)$ sur le point $(0, 1, 0)$ (on rappelle que $\vec{M}$ effectue un transfert $(0, 1, 0) \to (0, -1, 0)$). Le résultat est donné sur la figure 5.13.

Pour mesurer la position des axes $\vec{X}(t)$ et $\vec{Y}(t)$ sur la sphère de Bloch, on recommence l'expérience avec différentes conditions initiales. L'axe $\vec{X}$ est initialement confondu avec $\vec{e}_3$ et $\vec{Y}$ avec $\vec{e}_1$. Pour la mesure de l'axe $\vec{X}$, aucun pulse n'est nécessaire avant le TRE, car il est initialement au pôle nord de la sphère de Bloch. Pour le vecteur $\vec{Y}$, on applique un $\pi/2$-pulse le long de $\vec{e}_2$ pour l'envoyer sur le point $(1, 0, 0)$ de la sphère de Bloch. Les résultats sont donnés sur la figure 5.14. Nous avons choisi $k = 0.7$ en raison de certaines propriétés de robustesse du transfert d'état à état $(0, 1, 0) \to (0, -1, 0)$. Nous avons vu que dans la configuration (a), le transfert d'état à état d'une trajectoire proche de la séparatrice est robuste lorsque k se rapproche de 1. Dans la configuration présente, i.e. (b), le transfert $(0, 1, 0) \to (0, -1, 0)$ est proche de la séparatrice et possède des propriétés

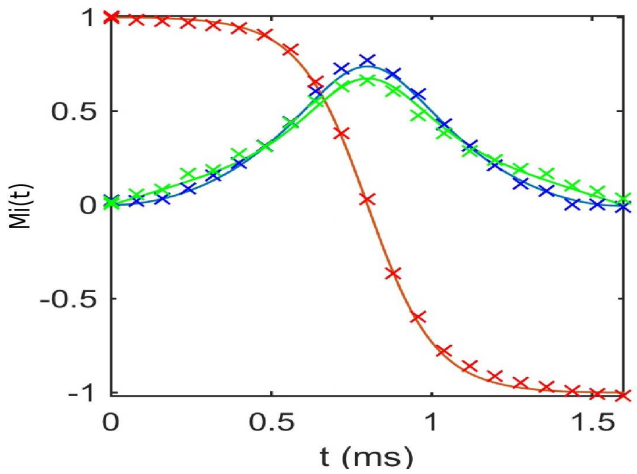

FIGURE 5.13 – Composantes du vecteur $\vec{M}$ en fonction du temps. Les courbes en bleu, en rouge et en vert correspondent respectivement à M_1, M_2 et M_3. Les lignes pleines sont les trajectoires théoriques et les croix sont les points mesurés expérimentalement.

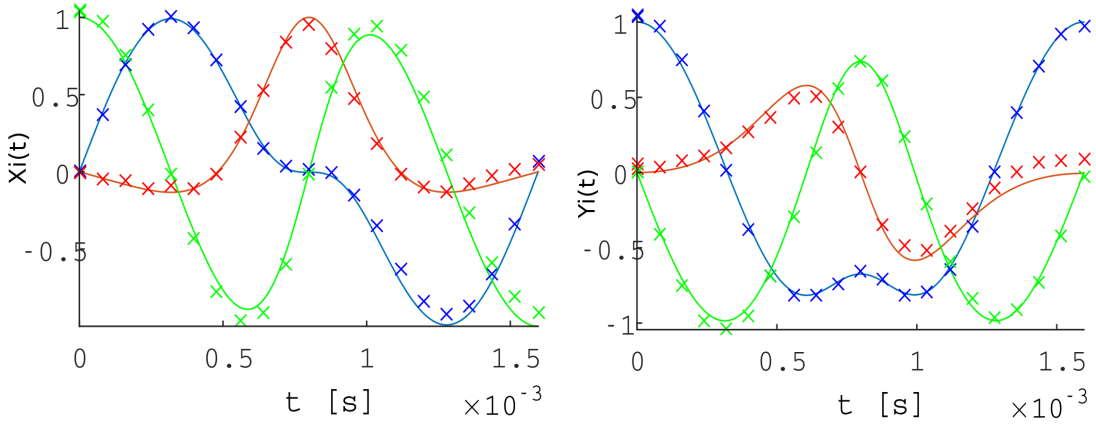

FIGURE 5.14 – Composantes des vecteurs $\vec{X}$ (à gauche) et $\vec{Y}$ (à droite) en fonction du temps. Les courbes en bleu, en rouge et en vert correspondent aux composantes selon $\vec{e}_1$, $\vec{e}_2$ et $\vec{e}_3$, respectivement.

de robustesse similaires à l'inversion de population de la configuration (a). Nous avons mesuré la robustesse par rapport aux inhomogénéités du champ de contrôle, en définissant un facteur d'échelle α sur l'amplitude. En d'autre termes, on considère l'équation de Bloch suivante:

$$\dot{\vec{M}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \omega_2 \\ 0 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} \vec{M} + \alpha \begin{pmatrix} 0 & 0 & \omega_2 \\ 0 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} \vec{M}. \tag{5.59}$$

Le facteur α représente une erreur sur l'amplitude du champ de contrôle. On définit une fidélité $J_2 = -M_2(t_f)$, qui est égale à 1 lorsque le transfert $(0,1,0) \rightarrow (0,-1,0)$ est parfaitement réalisé, inférieure à 1 sinon. Nous avons mesuré, pour plusieurs valeurs de

α, la fidélité J_2 du transfert réalisé avec le pulse TRE. Nous avons comparé le profil de robustesse $J_2(\alpha)$ du transfert réalisé par le pulse TRE avec celui correspondant à un $\pi-$ pulse constant de même durée. Le résultat est donné sur la figure 5.15. On observe la bonne robustesse du transfert $(0,1,0) \to (0,-1,0)$ par rapport au facteur α.

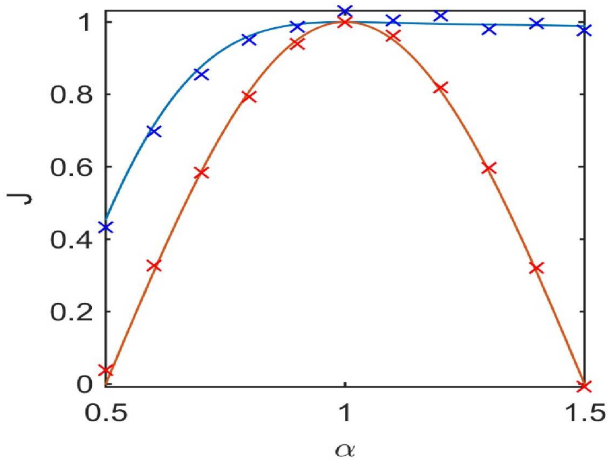

FIGURE 5.15 – Profil de robustesse du transfert $(0,1,0) \to (0,-1,0)$ réalisé avec le pulse TRE (en bleu) et avec un $\pi-$ pulse constant (en rouge). Les traits pleins sont les courbes théoriques et les croix sont les mesures expérimentales.

5.5 Phase de Montgomery

Dans la section précédente, nous avons évoqué le fait que la phase globale ϕ est donnée par une expression compliquée, composée d'intégrales elliptiques de première et troisième espèce. Cependant, cette phase peut être décrite de manière qualitative et géométrique, par une formule appelée la *phase de Montgomery* [33, 34]. Cette phase est la réponse à la question suivante posée par Montgomery: Lorsque $\vec{M}$ effectue un cycle complet et revient à sa position initiale dans le repère $\mathcal{S}$, de quel angle le solide a-t-il tourné autour de $\vec{M}$? Cette phase est donnée par la variation de l'angle d'Euler ϕ qui décrit la phase globale du système, ce que nous allons montrer dans la suite. Elle est composée d'un terme linéaire, appelé *phase dynamique*, et d'un autre purement géométrique, que l'on nomme *phase géométrique*. Cette structure est la même que la célèbre phase de Berry [126, 31, 32], qui est une phase qui apparaît pour des solutions adiabatiques cycliques des équations de Schrödinger.

Proposition 5.5.1 *La variation de la phase globale $\Delta\phi$ du système est donnée, après une période T du moment cinétique dans le repère $\mathcal{S}$, par la phase de Montgomery qui s'écrit sous la forme:*

$$\Delta\phi = 2ET - \mathcal{A}, \tag{5.60}$$

où $\mathcal{A}$ est l'angle solide balayé par le vecteur $\vec{M}$ pendant un cycle.

La variation $\Delta\phi$ se décompose en deux parties, la *phase dynamique*, donnée par $2ET$, et la *phase géométrique*, $\mathcal{A}$, qui correspond à l'angle solide délimité par une trajectoire $\vec{M}$ d'énergie E. Cette formule est bien plus intuitive qu'une expression composée d'intégrales elliptiques. L'intégrale elliptique de troisième espèce correspond à la surface $\mathcal{A}$. La démonstration de cette formule est relativement directe. En partant de la conservation de l'énergie, i.e. $2E = M_1^2 + k^2 M_2^2$, on arrive à la relation $2E = k^2 \cos^2\psi + \cos^2\theta(1 - k^2\cos^2\psi)$. Par identification de chaque terme avec le système (5.30), on obtient:

$$\dot{\phi} = 2E - \dot{\psi}\cos\theta. \tag{5.61}$$

En exprimant $\cos\theta$ sous forme d'intégrale, on a:

$$d\phi = 2Edt - \int_{\frac{\pi}{2}}^{\theta} \sin\theta' d\theta' d\psi. \tag{5.62}$$

Finalement, l'intégration sur une période donne la formule suivante:

$$\Delta\phi = 2ET - \int_{\psi(0)}^{\psi(T)} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\theta(\psi)} \sin\theta d\theta d\psi. \tag{5.63}$$

Le dernier terme de cette équation n'est rien d'autre que la surface sphérique incluse dans la courbe paramétrée par θ et ψ sur une période, c'est-à-dire l'angle solide balayé par $\vec{M}$ pendant un cycle. Cette phase géométrique est illustrée sur la figure 5.16.

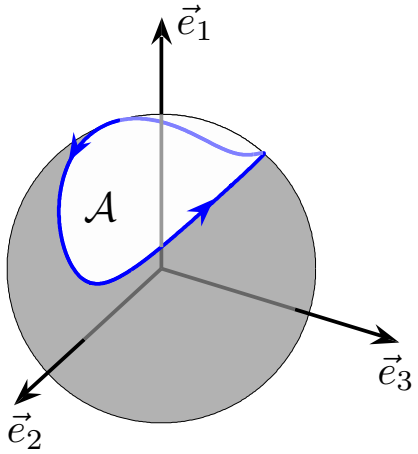

FIGURE 5.16 – Angle solide correspondant à la partie géométrique de la phase de Montgomery pour une trajectoire tournante.

La phase de Montgomery est de la même forme que la phase de Berry [31], composée, elle aussi, d'une phase dynamique et d'une phase géométrique. La phase de Berry intervient pour des trajectoires cycliques adiabatiques sur la sphère de Bloch. Jones et. al. [50] ont montré que la partie dynamique de la phase de Berry peut être annulée en faisant faire au système deux cycles, en appliquant un π-pulse intense avant et après le deuxième cycle. Cette méthode a permis d'implémenter une porte phase purement géométrique. D'autres techniques ont été mises au point pour implémenter des portes phase géométriques, sans

que les trajectoires soient nécessairement adiabatiques [119, 120, 127, 128, 129]. Elles sont basées sur la formule proposée par Aharanov-Anandan [118], qui est une forme plus générale que la phase Berry qui peut prendre en compte n'importe quelle trajectoire cyclique. Cependant, ces méthodes ne sont pas générales, elles ne s'appliquent que dans les systèmes considérés dans ces articles. Elles considèrent des trajectoires circulaires sur la sphère de Bloch qui ont l'avantage de s'exprimer simplement. Aucune méthode générale permettant d'annuler la phase dynamique pour n'importe quelle trajectoire cyclique n'a été publiée dans la littérature à notre connaissance.

Nous proposons dans ce paragraphe une méthode adaptée à notre problème pour réaliser des portes phases purement géométriques. La figure 5.8 montre que les trajectoires tournantes évoluent dans le sens indirect autour de l'axe $\vec{e}_1$ de la sphère de Bloch. Cependant, le sens de rotation peut être inversé en changeant le signe du contrôle ω_1. En parcourant un cycle dans le sens direct, puis le même dans le sens indirect, la phase résultante $\Delta\phi_1 + \Delta\phi_2$ s'annule, la partie dynamique comme la partie géométrique. En changeant la valeur de k pour le deuxième cycle, la phase totale n'est pas nulle, mais n'est pas purement géométrique, car les phases dynamiques n'ont pas de raison de s'annuler. Cependant, pour le deuxième cycle, il est toujours possible de trouver une trajectoire de sorte que la phase dynamique soit la même que celle du premier cycle. Mais dans ce cas, il n'y a pas de raison pour que les deux cycles commencent et finissent sur le même point de la sphère de Bloch. Cette méthode nécessite donc de faire appel à d'autres techniques afin de relier les deux cycles. Cette méthodologie est utilisée dans [120], mais elle demande une très bonne maîtrise du système, surtout si l'on souhaite la mettre en œuvre expérimentalement. Ces différents cas sont illustrés sur la figure 5.17. Sur cette figure, nous avons considéré à chaque fois deux demi-cycles et non deux cycles entiers. D'après les propriétés des fonctions de Jacobi, la formule de Montgomery est toujours valable dans ce cas puisqu'elle vérifie $\Delta\phi(T/2) = ET + \mathcal{A}/2$.

On rappelle qu'au voisinage des points d'équilibre instable, l'évolution du système est extrêmement lente. Le transfert entre deux points d'équilibre instable prend donc un temps arbitrairement long, suivant la précision à laquelle on souhaite atteindre ces points. Dans ce cas, la phase $\Delta\phi$ tend vers l'infini. Néanmoins, la phase géométrique n'est que peu affectée, car pour un temps suffisamment long, la trajectoire effectue approximativement un demi-cycle très proche de la séparatrice. En particulier, sur la séparatrice, on peut augmenter arbitrairement la durée du transfert. Seule la phase dynamique est véritablement modifiée car elle est proportionnelle au temps. Le long de la séparatrice, la phase dynamique est donc librement ajustable alors que la partie géométrique est fixe. De plus, nous allons voir que la phase géométrique associée à un transfert $(0, -1, 0) \rightarrow (0, 1, 0)$ s'exprime très simplement.

Nous allons utiliser ce processus pour réaliser une porte phase géométrique en mettant en œuvre le protocole suivant:

— Dans un premier temps, on réalise le transfert $\vec{M}_a(0) \simeq (0, -1, 0) \rightarrow \vec{M}_a(t_f) \simeq$

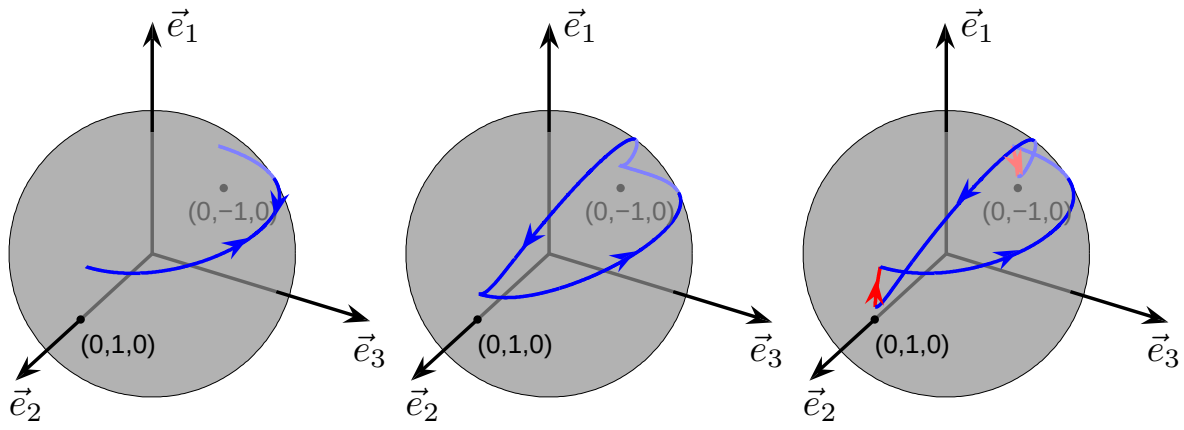

FIGURE 5.17 – Cycles susceptibles d'annuler la phase dynamique. A l'instant $t = t_f$, le vecteur de bloch revient à sa position initiale, ici le voisinage du point $(0, -1, 0)$. *A gauche:* On parcourt un premier chemin dans le sens indirect autour de l'axe $\vec{e}_1$, puis le même chemin dans le sens direct en changeant le signe du contrôle ω_1. La phase totale à la fin du processus est nulle. *Au centre:* On utilise le même protocole, cette fois en changeant la valeur du paramètre k entre le premier et le deuxième chemin. Aucune des phases ne s'annulent, la phase résultante est toujours composée d'une partie dynamique et d'une partie géométrique. *A droite:* Les deux trajectoires sont associées à différentes valeurs de k. La deuxième trajectoire est calculée de sorte que seules les phases dynamiques s'annulent. Cela nécessite de trouver un moyen pour connecter les trajectoires (chemins rouges). La phase résultante est purement géométrique.

$(0, 1, 0)$ le long de la séparatrice en un temps T_a suffisamment long et avec une certaine valeur de k_a.

— Puis, on reprend la séparatrice dans le sens opposé (en inversant le signe de ω_1), mais avec une valeur $k_b \neq k_a$. On ajuste le temps T_b de façon à ce que les phases dynamiques s'annulent.

Les trajectoires sont représentées sur la figure 5.18 et le procédé est explicité dans le tableau 5.7. L'avantage de cette méthode est que les trajectoires se rejoignent au niveaux des points d'équilibre, ou plus exactement sont arbitrairement proches l'une de l'autre sur ces points, de telle manière qu'il n'est pas nécessaire de chercher des techniques pour connecter les deux trajectoires.

La phase géométrique associée à chaque trajectoire est relativement simple à déterminer. On a:

$$\mathcal{A}/2 = \int_0^{\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\theta(\psi)} \sin\theta d\theta d\psi = \int_0^{\pi} \cos\theta(\psi) d\psi. \tag{5.64}$$

Or, la conservation de l'énergie donne la relation suivante:

$$\cos^2\theta = \frac{2E - k^2\cos^2\psi}{1 - k^2\cos^2\psi}. \tag{5.65}$$

Chemin (a)	Chemin (b)
$t \in [0, T_a]$	$t \in [T_a, T_a + T_b]$
T_a suffisamment long	$T_b = \frac{k_a}{k_b} T_a$
$\omega_1(t) = k_a \operatorname{sech}(\omega_a t + \rho_a)$	$\omega_1(t) = -k_b \operatorname{sech}(\omega_b t + \rho_b)$
$\omega_2(t) = k_a^2 \tanh(\omega_a t + \rho_a)$	$\omega_2(t) = k_b^2 \tanh(\omega_b t + \rho_b)$
$\rho_a = -T_a/2$	$\rho_b = -T_b/2 - T_a$.

TABLE 5.7 – Procédé suivi pour réaliser une porte phase géometrique. Le signe de ω_1 change dans le cycle (b), afin de suivre le chemin (b) dans le sens opposé à celui du chemin (a).

Sur la séparatrice, on a $2E = k^2$. De plus, on a $\psi \in [0, \pi]$, ce qui implique que $\sin\psi > 0$. Par conséquent, l'intégrale à calculer est de la forme:

$$\mathcal{A}/2 = \int_0^{\pi} \frac{k \sin\psi d\psi}{\sqrt{1 - k^2 \cos^2\psi}}. \tag{5.66}$$

La primitive de la fonction à intégrer est donnée par $-\arcsin(k\cos\psi)$. Finalement, l'intégration conduit à la phase géométrique suivante:

$$\mathcal{A}/2 = 2\arcsin(k). \tag{5.67}$$

Pour le chemin (a), la trajectoire parcourt la séparatrice dans le sens indirect autour de $\vec{e}_1$ et dans le sens direct pour le chemin (b). Ainsi, la variation de la phase $\Delta\phi$ est donnée, dans chaque cas, par:

$$\Delta\phi_a = k_a T_a - 2\arcsin(k_a), \quad \Delta\phi_b = -k_b T_b + 2\arcsin(k_b). \tag{5.68}$$

En choisissant la valeur de T_b de telle sorte que $T_b = (k_a/k_b)T_a$, la phase dynamique du cycle (b) s'annule avec celle du cycle (a) et on obtient une phase purement géométrique de la forme:

$$\Delta\phi = \Delta\phi_a + \Delta\phi_b = 2\arcsin(k_b) - 2\arcsin(k_a). \tag{5.69}$$

Par exemple, pour réaliser une porte phase de telle sorte que $\Delta\phi = \pi/2$, on peut choisir:

$$k_a = \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}, \quad k_b = \frac{\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2}. \tag{5.70}$$

De cette façon, on obtient $\Delta\phi_a = \pi/8$ et $\Delta\phi_b = 3\pi/8$. La phase totale est bien $\pi/2$. Les chemins (a) et (b) ainsi que la phase géométrique sont représentés sur la figure 5.18. Nous avons fixé $T_a = 100$ pour assurer une bonne précision. Cette transformation réalise une porte phase de la forme:

$$|\zeta(t_f)\rangle = \pm \begin{pmatrix} e^{-i\mathcal{A}/2} & 0 \\ 0 & e^{i\mathcal{A}/2} \end{pmatrix} |\zeta(0)\rangle\,, \tag{5.71}$$

avec $\mathcal{A} = 2\arcsin(k_b) - 2\arcsin(k_a)$.

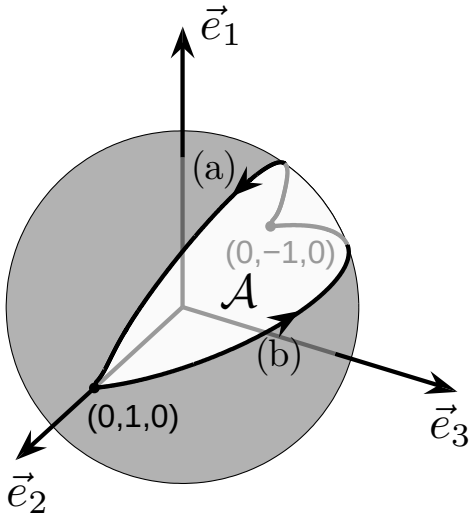

FIGURE 5.18 – Trajectoire $\vec{M}(t)$ qui permet de réaliser une porte phase de $\pi/2$. $\mathcal{A}$ est la surface blanche. Cette surface est égale à la phase résultante, i.e. $\mathcal{A} = \Delta\phi_a + \Delta\phi_b = \pi/2$.

5.6 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons calculé des familles de pulses pour le contrôle d'un système à deux niveaux en faisant l'analogie entre les équations de Bloch et les équations d'Euler décrivant la dynamique d'une toupie en rotation libre. Ces équations sont analogues, à l'exception que l'identification nécessite de considérer une toupie particulière pour laquelle l'un des moments d'inertie principaux tend vers l'infini. Les autres moments d'inertie sont arbitraires et sont décrits par le paramètre k. Le vecteur de Bloch $\vec{M}$ est analogue au moment cinétique du solide. Dans le cas d'une toupie asymétrique, le moment cinétique décrit des trajectoires périodiques dans le repère attaché à la toupie, dont la période et la forme dépendent des conditions initiales et des propriétés du solide. Chacune de ces trajectoires est associée à un champ de contrôle qui permet de contrôler la dynamique du système quantique à deux niveaux.

Dans la section 5.3, nous avons montré que cette méthode permet de retrouver géométriquement plusieurs résultats connus comme, entre autres, la solution d'Allen-Eberly, pour laquelle aucune explication géométrique n'avait été donnée dans la littérature. Les familles de solutions que nous avons obtenues montrent une continuité allant de simples pulses constants à des pulses circulaires, hyperboliques, puis adiabatiques. La méthode permet de choisir des pulses hybrides entre ces différentes familles, en ajustant les deux paramètres k et E, qui dépendent respectivement de la forme du solide et des conditions initiales de la trajectoire classique considérée.

Dans la section 5.4, nous avons mis au point une méthode qui permet de calculer des champs de contrôle qui réalisent des portes quantiques, qui sont relativement simples lorsque l'on choisit certaines trajectoires classiques particulières. Cela nous a permis de

mettre au point *l'effet de la raquette de tennis quantique*, qui correspond à la même porte quantique que celle réalisée par un π- pulse standard (la porte NOT). Cet effet a été implémenté expérimentalement à l'Université Technique de Munich par l'équipe de S. J. Glaser et montre un très bon accord théorie/expérience.

Dans la section 5.5, nous nous sommes servi d'une propriété particulière des équations d'Euler, à savoir la phase de Montgomery, afin d'implémenter des portes phase, utiles en information quantique [64]. Comme pour la phase de Berry, qui intervient pour des trajectoires adiabatiques, la phase de Montgomery est composée d'une partie géométrique et d'une partie dynamique. Nous avons mis au point une méthode particulière, basée sur les points d'équilibre instable du portrait de phase d'une toupie en rotation, qui permet de générer des portes phase purement géométriques données par une formule très simple. Les portes phase mises en œuvre ne font pas intervenir de solutions adiabatiques.

Chapitre 6

Contrôle optimal numérique: Application en information quantique

6.1 Introduction

La cohérence et l'intrication quantique sont des propriétés essentielles en information quantique [130]. Sur le long terme, le but des recherches dans ce domaine est de mettre en œuvre des dispositifs expérimentaux capables de manipuler un grand nombre de qubits à l'aide d'opérations logiques [131, 132]. Les portes à un ou deux qubits sont donc des éléments de base en information quantique. La théorie du contrôle optimal a permis de réaliser des portes robustes à deux qubits distants l'un de l'autre [23], ou des portes phase sur des puces à atomes [133], et autres portes à deux qubits (cf. [38] pour plus de références). Les applications requièrent que la porte soit réalisée avec une très bonne précision, avec une erreur relative inférieure à 10^{-4} [18] et en un temps court pour éviter les interactions avec l'environnement. Cela nécessite donc de minimiser l'effet des imperfections expérimentales. Nous avons vu dans le chapitre 1 que l'effet des inhomogénéités des champs de contrôle peut être diminué en utilisant des champs de contrôle conçus pour être robustes. La mise en œuvre de tels pulses est un sujet très actuel [52, 134, 135, 136, 137]. Les pulses en question doivent être à la fois robustes, de courte durée et peu énergétiques [35]. Par exemple, un π-pulse standard permet de réaliser une rotation d'angle π en un temps court et une énergie minimum, mais n'est que peu robuste. En revanche, les techniques adiabatiques permettent de calculer des champs robustes, mais très énergétiques ou qui nécessitent un temps long [29]. Plusieurs travaux proposent des techniques qui permettent de réaliser un compromis. C'est le cas de la méthode des pulses composites [87, 138, 139, 140], le passage adiabatique parallèle [141], la méthode dite de "Shortcut to adiabaticity" (raccourci adiabatique) [36, 142] qui comprend notamment le "Single shot shaped pulse" (pulse continu mis en forme) [35] que nous allons utiliser ici.

Des méthodes purement numériques de contrôle optimal ont aussi été utilisées pour réaliser des transformations unitaires. Elles permettent de maîtriser la durée du transfert et l'énergie des champs [59, 60] tout en maximisant la robustesse du transfert. Le principal défaut d'une méthode purement numérique est qu'il faut considérer un très grand nombre de paramètres (de l'ordre de mille pour GRAPE), il est donc difficile d'avoir une interprétation physique des résultats, qui peuvent aussi dépendre des paramètres numériques choisis (pas de temps, algorithme de propagation...), et du champ de contrôle initial que l'on utilise dans l'algorithme. Pour ces raisons, il est intéressant de combiner des méthodes numériques avec des méthodes analytiques, afin d'avoir un nombre limité de paramètres à optimiser numériquement. Cette technique permet d'obtenir des champs de contrôle qui peuvent s'écrire explicitement, dans le sens où ce sont des fonctions qui s'écrivent analytiquement et qui ne dépendent que d'un petit nombre de paramètres. Cela est possible avec l'algorithme GRAPE. Cette méthode offre la possibilité d'utiliser tous les avantages des méthodes numériques, à savoir le fait de pouvoir contrôler l'énergie et l'intensité du champ de contrôle ou encore d'améliorer la robustesse selon des critères choisis par l'utilisateur. Cette approche permet aussi de comprendre physiquement les mécanismes du contrôle obtenu par l'algorithme. En effet, suivant la manière dont on définit les contrôles analytiques, cette méthode permet d'approfondir une analyse physique préalable limitée par la complexité des calculs ou la difficulté à intégrer les équations du mouvement.

Cette technique a été utilisée dans [51] pour réaliser une inversion de population qui ne tient pas compte de la phase de l'état. Les auteurs ont exprimé les champs de contrôle sous forme de séries de Fourier et ont optimisé numériquement les coefficients à partir de l'algorithme GRAPE. Ils ont pu obtenir un champ de contrôle relativement peu énergétique et robuste, qui dépend de 20 paramètres au total.

Dans ce chapitre, nous allons appliquer une méthode de contrôle numérique dans le but d'optimiser des champs de contrôle qui s'expriment de façon analytique afin d'améliorer la robustesse d'une porte NOT. La première étape consiste à déterminer une base de fonctions analytiques adéquate pour traiter le problème de la robustesse par rapport aux inhomogénéités des champs de contrôle. Pour cela, nous utiliserons la méthode SSSP proposée dans [35, 36]. Nous allons voir que cette méthode analytique est une méthode inverse, qui consiste à paramétrer les solutions de l'équation de Schrödinger et d'en déduire les champs de contrôle correspondants. Elle donne une base de fonctions paramétrées dans laquelle sont décomposés les champs de contrôle. Ces paramètres peuvent alors être choisis de façon à améliorer la robustesse de la porte quantique. Cela peut-être fait analytiquement dans une certaine mesure. Plus exactement, dans ce dernier cas, la robustesse ne peut être améliorée que localement [35, 36]. De plus, les calculs sont d'autant plus complexes que le transfert est robuste car cela nécessite la prise en compte de nombreux coefficients. Nous allons donc optimiser numériquement les coefficients dans cette base avec l'algorithme GRAPE, que nous allons adapter à des fonctions paramétrées [92] (voir la section 2.5 du chapitre 2). L'avantage de l'optimisation numérique est qu'elle permet

d'améliorer la robustesse sur une plage d'inhomogénéités arbitrairement grande, contrairement à la méthode analytique qui n'est que locale. En outre, l'optimisation numérique permet de contrôler l'aire et l'intensité du champ de contrôle. Les coefficients de cette base peuvent donc être manipulés et contraints librement grâce à GRAPE, ce qui est très commode pour explorer les limites de la paramétrisation des contrôles.

Le NON logique (ou porte NOT) est une opération logique de base qui s'applique à un seul qubit (voir la section 1.3 du chapitre 1). Un bit classique peut être dans un état 0 ou 1. S'il est dans l'état 0, l'opération l'envoie dans l'état 1 et réciproquement. Dans le cas quantique, l'état étant une combinaison linéaire des états $|0\rangle$ et $|1\rangle$, la porte NOT vérifie:

$$|\lambda(T)\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} |\lambda(t_0)\rangle \,, \tag{6.1}$$

où T est la durée du transfert. Comme nous l'avons vu dans le chapitre 1, ce transfert correspond à une rotation d'un angle π autour de l'axe y de la sphère de Bloch. Remarquons que cette opération est une transformation du groupe unitaire $SU(2)$ puisque son déterminant est égal à 1. Nous avons vu dans le chapitre 1 qu'une telle transformation, qui correspond à la rotation d'un repère dans la sphère de Bloch, peut être paramétrée par trois angles d'Euler. Elle correspond à un transfert qui tient compte de la phase globale de l'état quantique.

Pour le montrer, on peut se servir du fait que l'opérateur d'évolution peut s'écrire en fonction des paramètres de Cayley-Klein sous la forme [66]:

$$U(t) = \begin{pmatrix} a & -b^* \\ b & a^* \end{pmatrix} , \tag{6.2}$$

où x^* désigne le complexe conjugué de x. La connaissance de a et b est donc suffisante pour connaître la matrice d'évolution. Pour réaliser la porte définie par l'équation (6.1), on peut donc considérer le transfert suivant:

$$|\lambda(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow |\lambda(T)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} . \tag{6.3}$$

Cette transformation consiste donc en une inversion qui tient compte de la phase globale du système. L'état $|\lambda\rangle$ a ici pour coordonnées les paramètres a et b. Le but de ce chapitre est de calculer des champs de contrôle qui réalisent la transformation (6.3) de manière robuste.

Dans la section 6.2, on introduit le modèle et la méthode SSSP. On calcule analytiquement un jeu de paramètres associé à un champ de contrôle relativement robuste. Ces paramètres sont ensuite optimisés numériquement dans la section 6.3, afin d'améliorer la robustesse de la porte NOT. Nous avons optimisé les résultats de deux façons différentes. La première consiste à augmenter une fidélité moyenne, sans aller chercher une très grande précision. La deuxième permet d'améliorer la robustesse de manière à avoir une erreur

très faible (inférieure à 10^{-4}) sur une petite plage d'inhomogénéités. La section 6.4 est consacrée à une application expérimentale, réalisée dans le groupe de T. Halfmann à l'Institut de Physique Appliquée de Darmstadt en Allemagne. Nous allons voir que ce travail est naturellement comparable à la méthode des pulses composites [54] qui consiste aussi à paramétrer les champs de contrôle par un nombre restreint de paramètres. La section 6.5 est dédiée aux pulses composites. L'algorithme numérique est expliqué dans la section 6.6. Nous concluons ce chapitre par la section 6.7. Ce travail a donné lieu à la soumission d'un article dans *Physical Review Letters* [143].

6.2 Modèle et méthode

La méthode analytique utilisée est tirée de l'article [35]. Cet article propose une paramétrisation pour réaliser une inversion de population robuste par rapport aux inhomogénéités considérées dans la référence [35]. Nous avons étendu cette paramétrisation pour pouvoir mettre en œuvre une transformation unitaire. La démarche est basée sur une méthode inverse, qui consiste à trouver une paramétrisation "intelligente" des solutions puis d'en déduire le champ de contrôle associé.

On considère un système à deux niveaux dont la dynamique est gouvernée par l'équation de Schrödinger dépendante du temps suivante:

$$i\hbar\partial_t \left|\lambda_{\alpha,\delta}\right\rangle = \left(H_0 + V(\alpha,\delta)\right)\left|\lambda_{\alpha,\delta}\right\rangle . \tag{6.4}$$

Les paramètres δ et α représentent respectivement les inhomogénéités du champ statique $\vec{B}_0$ et du champ de contrôle $\vec{B}_1$ [51]. L'opérateur H_0 est la partie homogène du Hamiltonien et V la partie perturbée. Ce sont des matrices 2×2 données par:

$$H_0 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \Omega_x - i\Omega_y \\ \Omega_x + i\Omega_y & \end{pmatrix}, \quad V = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -\delta & \alpha(\Omega_x - i\Omega_y) \\ \alpha(\Omega_x + i\Omega_y) & \delta \end{pmatrix}. \tag{6.5}$$

Dans un premier temps, on considère que le système est homogène, i.e. qu'il est gouverné par l'équation $i\hbar\partial_t \left|\lambda_0\right\rangle = H_0 \left|\lambda_0\right\rangle$. La solution du système homogène, notée $\left|\lambda_0\right\rangle$, peut être paramétrée par trois angles d'Euler, que nous noterons θ, χ et γ. Sur la sphère de Bloch, les angles θ et χ permettent de repérer le vecteur de Bloch et γ est la phase globale. L'état $\left|\lambda_0\right\rangle$ peut être paramétré de la façon suivante:

$$\left|\lambda_0\right\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)e^{i\chi/2} \\ \sin(\theta/2)e^{-i\chi/2} \end{pmatrix} e^{-i\gamma/2}. \tag{6.6}$$

Dans cette configuration, θ est l'angle polaire de la sphère de Bloch et χ l'angle azimutal. En d'autres termes, le vecteur de Bloch est repéré par θ et χ suivant $\vec{M} = \sin\theta\cos\chi\vec{e}_x + \sin\theta\sin\chi\vec{e}_y + \cos\theta\vec{e}_z$. Pour le système homogène, on peut montrer que la dynamique des

angles d'Euler vérifie:

$$\begin{cases} \dot{\theta} = \Omega_x \sin\chi + \Omega_y \cos\chi \\ \dot{\chi} = \frac{1}{\tan\theta}\Big(\Omega_x \cos\chi - \Omega_y \sin\chi\Big) \\ \dot{\gamma} = \frac{1}{\sin\theta}\Big(\Omega_x \cos\chi - \Omega_y \sin\chi\Big). \end{cases} \tag{6.7}$$

Les composantes Ω_x et Ω_y du champ de contrôle s'expriment alors sous la forme:

$$\Omega_x = \dot{\theta}\sin\chi + \dot{\gamma}\sin\theta\cos\chi, \quad \Omega_y = \dot{\theta}\cos\chi - \dot{\gamma}\sin\theta\sin\chi. \tag{6.8}$$

La philosophie d'une méthode inverse consiste à se donner un chemin $(\theta(t), \chi(t), \gamma(t))$, puis d'en déduire les contrôles Ω_x et Ω_y associés.

On rappelle que le but est de réaliser le transfert donné par l'équation (6.3). L'équation (6.6) permet d'en déduire le transfert correspondant pour les angles d'Euler, qui est donné par:

$$\begin{cases} \theta_i = 0 \to \theta_f = \pi, \\ \chi_i = 0 \to \chi_f = 0, \\ \gamma_i = 0 \to \gamma_f = 2\pi, \end{cases} \quad \text{mod } 2\pi. \tag{6.9}$$

On considère une solution du système homogène gouverné par H_0 de la forme:

$$\theta = \pi t/T, \quad \gamma(t) = \frac{2\pi t}{T}, \quad \chi(t) = 2\sin\left(\frac{\pi t}{T}\right). \tag{6.10}$$

On peut calculer les champs de contrôle associés à cette trajectoire en utilisant la formule (6.8), ce qui mène à:

$$\begin{cases} \Omega_x = \frac{\pi}{T}\sin\left[2\sin\left(\frac{\pi t}{T}\right)\right] + \frac{2\pi}{T}\sin\left(\frac{\pi t}{T}\right)\cos\left[2\sin\left(\frac{\pi t}{T}\right)\right], \\ \Omega_y = \frac{\pi}{T}\cos\left[2\sin\left(\frac{\pi t}{T}\right)\right] - \frac{2\pi}{T}\sin\left(\frac{\pi t}{T}\right)\sin\left[2\sin\left(\frac{\pi t}{T}\right)\right]. \end{cases} \tag{6.11}$$

Ces champs de contrôle réalisent donc une porte NOT. Cependant, ils n'ont aucune raison d'être robuste. Pour trouver des champs robustes, l'idée est de paramétrer la trajectoire $(\theta(t), \gamma(t), \chi(t))$ de façon à ce que les champs de contrôle associés soient robustes.

On part du principe que la partie inhomogène V du Hamiltonien (6.5) va déformer la solution homogène. En d'autres termes, en présence des inhomogénéités α et δ, les solutions vont s'exprimer comme la somme d'une solution homogène donnée par (6.10) et d'une partie inhomogène.

Pour trouver une bonne paramétrisation des solutions, on utilise une approche analytique utilisée pour la méthode des pulses composites [87, 138, 139]. On définit une fidélité qui tient compte de la phase et qui s'exprime sous la forme:

$$J = \Re(\langle\lambda_0(T)|\lambda_{\alpha,\delta}(T)\rangle), \tag{6.12}$$

où $\lambda_{\alpha,\delta}(t)$ est solution de l'équation de Schrödinger $i\hbar\partial_t\,|\lambda_{\alpha,\delta}\rangle = (H_0 + V)\,|\lambda_{\alpha,\delta}\rangle$, et $\lambda_0(t)$ est la solution homogène, obtenue en injectant (6.10) dans (6.6).

On fait ensuite un développement limité de la fidélité J par rapport à α et δ autour du point $(\alpha, \delta) = (0, 0)$ jusqu'à un certain ordre (l'ordre étant limité par la complexité des calculs), i.e.:

$$J = 1 + J^{(1)} + J^{(2)} + J^{(3)} + \cdots . \tag{6.13}$$

On cherche ensuite une trajectoire qui permet d'éliminer les termes jusqu'à l'ordre choisi, ce qui a pour effet d'augmenter la robustesse du transfert, puisque le profil de robustesse du transfert est d'autant plus plat en $(\alpha, \delta) = (0, 0)$ que l'ordre jusqu'auquel les termes de la série s'annulent est grand. Ce phénomène est illustré sur la figure 6.1. Remarquons

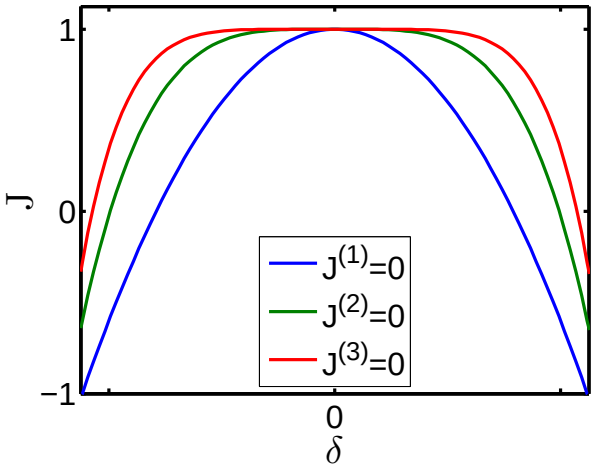

FIGURE 6.1 – Illustration du profil de la fidélité en fonction de l'ordre jusqu'auquel les dérivées de J en $\delta = 0$ s'annulent. On ne considère pas l'inhomogénéité α du champ de contrôle sur cette figure pour simplifier la description.

que cette méthode est locale car elle permet de maîtriser la robustesse du transfert dans le voisinage du point $(\alpha, \delta) = (0, 0)$.

La première étape consiste à exprimer l'état $|\lambda_{\alpha,\delta}(T)\rangle$ comme une série perturbative en fonction de α et δ. On introduit pour cela la matrice d'évolution $U_{\alpha,\delta}(t, 0)$, de telle sorte que $|\lambda_{\alpha,\delta}(t)\rangle = U_{\alpha,\delta}(t, 0)\,|\lambda_{\alpha,\delta}(0)\rangle$. On peut écrire $U_{\alpha,\delta}$ sous la forme:

$$U_{\alpha,\delta}(t, 0) = U_0(t, 0)U_I(t, 0), \tag{6.14}$$

avec U_0 la matrice d'évolution associée à la solution homogène $|\lambda_0\rangle$ et U_I la matrice d'interaction. La dynamique qui gouverne chacun de ces opérateurs est donnée par:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_0(t, 0) = H_0(t)U_0(t, 0), \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_I(t, 0) = V_I(t)U_I(t, 0), \tag{6.15}$$

avec $V_I(t) = U_0^\dagger(t, 0)V(t)U_0(t, 0)$, $U_0(0, 0) = \mathbb{1} = U_I(0, 0)$. On cherche à développer $U_I(T, 0)$ comme une série perturbative de la forme:

$$U_I = \mathbb{1} + \alpha \left.\frac{\partial U_I}{\partial \alpha}\right|_{(0,0)} + \delta \left.\frac{\partial U_I}{\partial \delta}\right|_{(0,0)} + \frac{\alpha^2}{2} \left.\frac{\partial^2 U_I}{\partial \alpha^2}\right|_{(0,0)} + \frac{\delta^2}{2} \left.\frac{\partial^2 U_I}{\partial \delta^2}\right|_{(0,0)} + \alpha\delta \left.\frac{\partial^2 U_I}{\partial \alpha \partial \delta}\right|_{(0,0)} + \cdots . \tag{6.16}$$

A titre d'exemple, on calcule les premiers termes de cette série, ce qui donne:

$$\begin{aligned}
\alpha \left.\frac{\partial U_I(T,0)}{\partial \alpha}\right|_{(0,0)} &= \alpha \int_0^T \frac{\partial}{\partial \alpha}\dot{U}(t,0)dt \\
&= -\frac{i\alpha}{\hbar}\int_0^T \frac{\partial}{\partial \alpha}\Big(V_I(t)U_I(t,0)\Big)_{(0,0)}\, dt \\
&= -\frac{i\alpha}{\hbar}\int_0^T U_0^\dagger(t,0)V_\alpha(t)U_0(t,0)dt \\
&= -U_0(0,T)\frac{i\alpha}{\hbar}\int_0^T U_0(T,t)V_\alpha(t)U_0(t,0)dt,
\end{aligned} \tag{6.17}$$

et de la même manière on obtient pour le deuxième terme:

$$\delta \left.\frac{\partial U_I(T,0)}{\partial \delta}\right|_{(0,0)} = -U_0(0,T)\frac{i\delta}{\hbar}\int_0^T U_0(T,t)V_\delta(t)U_0(t,0)dt, \tag{6.18}$$

où l'on a utilisé les propriétés $U(0,t) = U(0,T)U(T,t)$, $U^\dagger(t,0) = U(0,t)$ et où l'on a posé:

$$V_\alpha(t) = \frac{\partial V}{\partial \alpha} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \Omega_x - i\Omega_y \\ \Omega_x + i\Omega_y & 0 \end{pmatrix}, \quad V_\delta(t) = \frac{\partial V}{\partial \delta} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{6.19}$$

Le propagateur $U_{\alpha,\delta}(T,0)$ est donné par $U_{\alpha,\delta}(T,0) = U_0(T,0)U_I(T,0)$, ce qui donne, au premier ordre:

$$U_{\alpha,\delta}(T,0) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^T U_0(T,t)V(t)U_0(t,0)dt + O(\alpha^2,\delta^2,\alpha\delta). \tag{6.20}$$

L'état du système est donné par $|\lambda_{\alpha,\delta}(T)\rangle = U_{\alpha,\delta}(T,0)\,|\lambda_{\alpha,\delta}(0)\rangle = U_{\alpha,\delta}(T,0)\,|\lambda_0(0)\rangle$. Il s'obtient donc en multipliant (6.20) par $|\lambda_0(0)\rangle$. En allant jusqu'au deuxième ordre, l'état du système s'écrit alors sous la forme suivante:

$$|\lambda_{\alpha,\delta}(T)\rangle = |\lambda_0(T)\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_0^T U_0(T,t)V(t)\,|\lambda_0(t)\rangle\,dt - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^T dt\int_0^t U_0(T,t)V(t)U_0(t,t')V(t')\,|\lambda_0(t')\rangle\,dt'. \tag{6.21}$$

La matrice $U_0(t_1,t_2)$ s'exprime en fonction de $|\lambda_0\rangle$ et d'une solution de l'équation de Schrödinger $|\lambda_\perp\rangle$ perpendiculaire à $|\lambda_0\rangle$ sous la forme:

$$U_0(t_1,t_2) = |\lambda_0(t_1)\rangle\langle\lambda_0(t_2)| + |\lambda_\perp(t_1)\rangle\langle\lambda_\perp(t_2)|, \tag{6.22}$$

avec:

$$|\lambda_\perp(t)\rangle = \begin{pmatrix} \sin(\theta/2)e^{i\chi/2} \\ -\cos(\theta/2)e^{-i\chi/2} \end{pmatrix} e^{i\gamma/2}. \tag{6.23}$$

En multipliant $|\lambda_{\alpha,\delta}(T)\rangle$ par $\langle\lambda_0(T)|$, on obtient, après quelques calculs:

$$\langle\lambda_0(T)|\lambda_{\alpha,\delta}(T)\rangle = 1 - \tfrac{i}{2}\int_0^T e(t)dt - \tfrac{1}{4}\int_0^T dt\int_0^t [e(t)e(t') + f(t)\bar{f}(t')]dt', \tag{6.24}$$

avec:

$$e(t) = \langle \lambda_0(t)|V(t)|\lambda_0(t)\rangle = \delta\cos\theta - \alpha\dot{\gamma}\sin^2\theta \tag{6.25}$$

$$f(t) = \langle \lambda_0(t)|V(t)|\lambda_\perp(t)\rangle = (i\alpha\dot{\theta} - \alpha\dot{\gamma}\sin\theta\cos\theta - \delta\sin\theta)e^{i\gamma}. \tag{6.26}$$

Remarquons que le terme du premier ordre de l'expression (6.24) est purement imaginaire, il n'intervient donc pas dans la fidélité (6.13). Ceci signifie que les dérivées d'ordre 1 au point $(\alpha, \delta) = (0, 0)$ de J sont nécessairement nulles, c'est-à-dire que J est maximum en ce point. Par conséquent, le profil de la fidélité de l'équation (6.13) s'écrit, jusqu'au deuxième ordre:

$$J = 1 - \frac{1}{4}\int_0^T dt \int_0^t (e(t)e(t') + \Re[f(t)\bar{f}(t')])dt' + O(\alpha^3, \delta^3, \alpha^2\delta, \alpha\delta^2). \tag{6.27}$$

Cette expression peut s'écrire sous forme d'intégrales simples à partir de la propriété suivante:

$$\int_0^T dt \int_0^t dt'[a(t)b(t') + a(t')b(t)] = \int_0^T a(t)dt \int_0^T b(t)dt \tag{6.28}$$

En utilisant le fait que $\Re(f(t)\bar{f}(t')) = \Re(f(t))\Re(f(t')) + \Im(f(t))\Im(f(t'))$, on peut montrer que J devient:

$$J = 1 - \frac{1}{8}\left[\int_0^T \Re(f(t))dt\right]^2 - \frac{1}{8}\left[\int_0^T \Im(f(t))dt\right]^2 - \frac{1}{8}\left[\int_0^T e(t)dt\right]^2 + O^{(3)}, \tag{6.29}$$

avec:

$$\begin{cases} \Re(f(t)) = -\alpha(\dot{\gamma}\cos\gamma\sin\theta\cos\theta + \dot{\theta}\sin\gamma) - \delta\cos\gamma\sin\theta, \\ \Im(f(t)) = -\alpha(\dot{\gamma}\sin\gamma\sin\theta\cos\theta - \dot{\theta}\cos\gamma) - \delta\sin\gamma\sin\theta. \end{cases} \tag{6.30}$$

Le but est de déterminer une paramétrisation de γ et de θ qui permette d'annuler toutes les intégrales de l'équation (6.29). Les auteurs de l'article [35] ont montré que le terme $\int_0^T e(t)dt$ peut être annulé en choisissant γ de la façon suivante:

$$\gamma(\theta) = 2\theta + 2\sin(2\theta). \tag{6.31}$$

Nous ferons le calcul explicite un peu plus loin. L'expression de γ se généralise naturellement comme une série de la forme:

$$\gamma(\theta) = 2\theta + \sum_{n=1}^{N} C_n \sin(2n\theta). \tag{6.32}$$

Les auteurs de [35] ont montré que cette paramétrisation est pertinente pour réaliser une inversion de population. Dans l'article [35], la fonction $\theta(t)$ est choisie comme une fonction d'erreur, similaire à un arctangente, pour assurer la robustesse de l'inversion de population. Plus formellement, l'angle $\theta(t)$ est donné par:

$$\theta(t) = \frac{\pi}{2}\mathrm{erf}\left(\frac{t}{T} + 1\right) = \sqrt{\pi}\left[1 + \int_0^1 e^{-x^2}dx\right]. \tag{6.33}$$

Cependant, ce n'est pas suffisant dans notre cas, car nous considérons une transformation unitaire qui est plus difficile à réaliser. Pour pouvoir annuler toutes les intégrales de l'équation (6.29), on développe l'angle θ comme une série de Fourier de la forme:

$$\theta(t) = \frac{\pi}{T}t + \sum_{m=1}^{M} \theta_m \sin\left(2m\pi\frac{t}{T}\right). \tag{6.34}$$

On peut ainsi calculer les paramètres θ_n et C_n de façon à annuler les intégrales de l'équation (6.29). Certaines de ces intégrales vont naturellement s'annuler à cause de la paramétrisation choisie. Pour les déterminer, il faut connaître la parité de chacune des fonctions. On peut facilement montrer que $\theta(T/2-t) = \pi - \theta(T/2+t)$, ce qui implique, entre autre, que $\cos(\theta(T/2-t)) = -\cos(\theta(T/2+t))$, c'est-à-dire que $\cos\theta$ est impair et donc que l'intégrale $\int_0^T \cos\theta dt$ est nulle quelques soient les valeurs des paramètres C_n et θ_n. En adoptant la même démarche pour toutes les autres fonctions, on peut en déduire leurs parités, puis en déduire les intégrales égales à zéro. La parité de chaque fonction est donnée dans le tableau 6.1. Les fonctions dans les intégrales qui nous intéressent étant des

Paire	$\sin\theta$	$\cos\gamma$	$\dot{\gamma}$	$\dot{\theta}$
Impaire	$\cos\theta$	$\sin\gamma$		

TABLE 6.1 – Parité des différentes fonctions nécessaires pour calculer les intégrales de l'équation (6.29).

produits des fonctions de ce tableau, on peut en déduire leur parité, pour finalement en déduire les intégrales qui s'annulent.

Les seules intégrales qu'il reste à annuler par un bon choix des coefficients C_n et θ_n sont les suivantes:

$$I_1 = \int_0^T \cos\gamma \sin\theta dt, \tag{6.35}$$

$$I_2 = \int_0^T (\dot{\gamma}\sin\gamma\sin\theta\cos\theta - \dot{\theta}\cos\gamma)dt, \tag{6.36}$$

$$I_3 = \int_0^T \dot{\gamma}\sin^2\theta dt. \tag{6.37}$$

La fidélité J est donnée, en fonction de ces intégrales, par $J = 1-1/8(\delta^2 I_1^2 + \alpha^2 I_2^2 + \alpha^2 I_3^2)$. Remarquons qu'en annulant I_1, on élimine tous les termes d'ordre δ^2, ce qui signifie que l'on augmente la robustesse par rapport aux inhomogénéités δ. De la même manière, on augmente la robustesse de la trajectoire par rapport à α en annulant I_2 et I_3. Ici, nous allons chercher des paramètres θ_n et C_n qui annulent les trois intégrales simultanément. L'intégrale I_3 peut s'exprimer analytiquement de la façon suivante:

$$\begin{aligned} I_3 &= 2\int_0^\pi \left[1 + \sum_{n=1}^{N} nC_n\cos(2n\theta)\right]\sin^2\theta d\theta \\ &= 2\int_0^\pi \sin^2\theta d\theta + 2\sum_{n=1}^{N} nC_n \int_0^\pi \cos(2n\theta)\sin^2\theta d\theta \\ &= \pi - C_1\frac{\pi}{2}. \end{aligned} \tag{6.38}$$

I_3 s'annule donc en choisissant $C_1 = 2$. Les autres intégrales ne s'expriment pas aussi simplement. Nous donnons donc une solution calculée numériquement pour les autres coefficients. Pour cela, on utilise un algorithme de T. Dekker [125] (fonction *fsolve* dans matlab), qui permet de trouver les zéros d'une fonction. On a finalement:

$$C_1 = 2, \quad C_2 = -1.735, \quad \theta_1 = -0.174, \quad \theta_2 = -0.163. \tag{6.39}$$

On connaît donc explicitement les variables $\theta(t)$ et $\phi(t)$ grâce aux équations (6.32) et (6.34). L'angle χ s'obtient en remarquant que $d\chi = d\gamma \sin\theta$ (Eq. (6.7)). A l'aide de l'équation (6.32), on arrive à:

$$\chi(\theta) = 2\sin\theta + \sum_{n=1}^{N} nC_n \left(\frac{\sin[(2n+1)\theta]}{2n+1} + \frac{\sin[(2n-1)\theta]}{2n-1} \right). \tag{6.40}$$

La trajectoire étant connue, on calcule le champ de contrôle associé via l'équation (6.8). La trajectoire et le champ de contrôle associé sont donnés sur la figure 6.2.

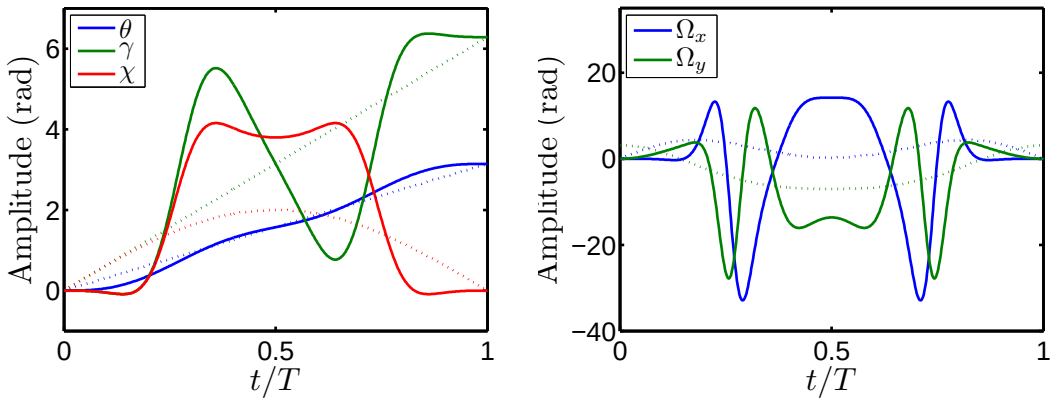

FIGURE 6.2 – *A droite:* Angles d'Euler en fonction du temps correspondants à la trajectoire robuste à l'ordre 2 (traits pleins) et à la solution à l'ordre 0 donnée par (6.10) (pointillés). *A gauche:* Champs de contrôle associés à la trajectoire robuste (traits pleins) et à la solution à l'ordre 0 (pointillés).

6.3 Optimisation numérique

Nous pourrions annuler les dérivées de J jusqu'à des ordres plus élevés afin d'augmenter encore la robustesse. Cependant, cette méthode ne nous assure une bonne robustesse que dans le voisinage de $(\alpha, \delta) = (0, 0)$ mais ne nous permet pas de contrôler la robustesse en dehors de cette région. Elle ne nous permet pas non plus de contrôler l'aire et l'intensité du pulse. La figure 6.3 suggère que même avec peu de coefficients θ_n et C_n, cette paramétrisation est adéquate pour améliorer la robustesse du transfert. Elle donne donc un ensemble de coefficients que l'on peut optimiser soit en cherchant analytiquement d'autres solutions robustes ou en optimisant numériquement les coefficients. Dans

cette section, nous allons utiliser l'algorithme GRAPE pour optimiser un petit nombre de ces coefficients (de l'ordre de 10), sur une large plage d'inhomogénéités δ et α. Cette démarche va nous permettre d'explorer l'efficacité de cette paramétrisation tout en ajoutant des contraintes sur le champ de contrôle, à savoir sur son intensité et son énergie. Le résultat robuste à l'ordre 2 présenté dans la section précédente servira de condition initiale pour l'algorithme d'optimisation.

L'algorithme consiste à optimiser le contrôle simultané d'un ensemble de $N_s = N_\delta \times N_\alpha$ spins (cf. chapitre 1). A chaque spin (n, m) correspond un couple de valeurs (α_n, δ_m). A $t = 0$, tous les spins sont dans l'état initial $|\lambda_{n,m}(0)\rangle = {}^t(1, 0)$. Chaque spin (n, m) a une dynamique gouvernée par l'équation de Schrödinger:

$$i\frac{d\,|\lambda_{n,m}(t)\rangle}{dt} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\delta_m & (1+\alpha_n)(\Omega_x(t) - i\Omega_y(t)) \\ (1+\alpha_n)(\Omega_x(t) + i\Omega_y(t)) & \delta_m \end{pmatrix} |\lambda_{n,m}(t)\rangle\,. \quad (6.41)$$

Les spins ont tous le même état cible, à savoir $|\lambda_c\rangle = |\lambda_0(T)\rangle = {}^t(0, -1)$. L'algorithme cherche donc un champ de contrôle $\vec{\Omega}(t) = \Omega_x\vec{u}_x + \Omega_y\vec{u}_y$ qui transfert tous les spins du système sur l'état cible. Plus exactement, il cherche des paramètres θ_n et C_n de sorte que le champ de contrôle correspondant maximise une fidélité moyenne de la forme:

$$J = \frac{1}{N_s}\sum_{n=1}^{N_\alpha}\sum_{m=1}^{N_\delta} \Re[\langle\lambda_{n,m}(T)|\lambda_0(T)\rangle], \quad (6.42)$$

qui est égale à 1 si tous les spins ont exactement atteint l'état cible à l'instant final T, inférieure à 1 sinon. Bien sûr, plus le champ de contrôle est robuste et plus J est proche de 1. Afin que l'algorithme GRAPE optimise les paramètres θ_n et C_n, on utilise une méthode présentée dans [92] et dans la section 2.5 du chapitre 2, qui permet d'optimiser les coefficients d'une fonction paramétrée. L'algorithme sera présenté en détails dans la section 6.6 de ce chapitre. Pour les résultats qui vont suivre, on initialise le programme en prenant les valeurs des paramètres θ_n et C_n de l'équation (6.39), puis on optimise la robustesse sur des domaines de valeurs $\delta \in [-20/T, 20/T]$ et $\alpha \in [-0.5, 0.5]$. La figure de robustesse associée à la solution (6.39) et le domaine d'optimisation sont montrés sur la figure 6.3.

On souhaite mettre en valeur les propriétés qui sont dues à la forme du pulse et non à son intensité ou à une aire élevée. En effet, si l'intensité du champ est très supérieure à l'offset $\delta_{\max}$, alors même un simple π- pulse de même intensité sera robuste par rapport à δ. Pour cette raison, sur les figures, on évalue la robustesse du contrôle jusqu'à des valeurs $\delta_{\max} \geq |\Omega|_{\max}$, où $|\Omega|_{\max} = \max(\sqrt{\Omega_x^2 + \Omega_y^2})$ est l'intensité maximale du champ de contrôle. Par exemple, pour la solution (6.39), on a $|\Omega|_{\max} \cdot T \simeq 33.5$. La figure 6.3 correspondante est évaluée jusqu'à $\delta_{\max} \cdot T = 40 \geq 33.5$. De plus, on étend α jusqu'à $\alpha_{\max} = 1$ pour avoir une vision globale du profil.

Dans l'algorithme, l'intensité maximale du pulse est contrainte à rester inférieure à $40/T$, en ajoutant un coût courant de la forme $J_A = \beta/2\int_0^T(\Omega_x^2 + \Omega_y^2)dt$, où le paramètre β est ajusté pour éviter que le champ n'ait une aire ou une intensité trop grande. Ceci est

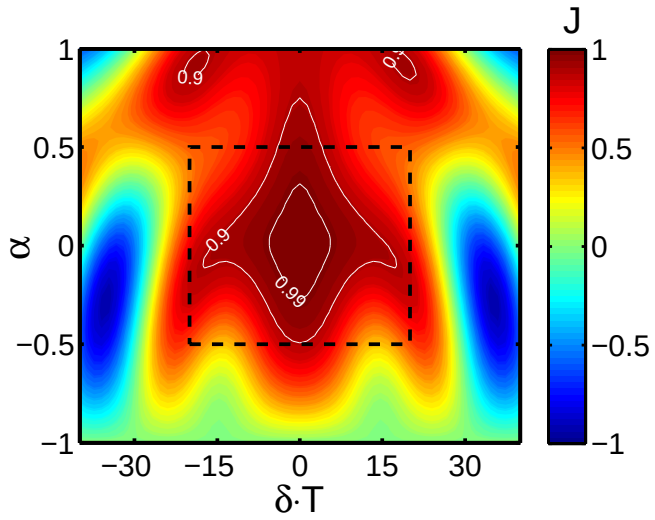

FIGURE 6.3 – Profil de la fidélité dans le plan (δ, α) du pulse associé à la solution (6.39), prise comme condition initiale avant l'optimisation numérique. Le programme optimise la région encadrée par le rectangle en pointillés.

expliqué dans la section 6.6 dédiée à l'algorithme. La figure 6.4 montre les composantes du champ de contrôle après optimisation selon le nombre de paramètres θ_n et C_n choisi, ainsi que les profils de robustesse associés. Le tableau 6.2 donne les propriétés physiques des champs de contrôle.

	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	Solution (6.39)
N_θ	2	2	3	3	4	18	2
N_C	2	3	2	3	4	18	2
N_{tot}	4	5	5	6	8	36	4
$\lvert\Omega\rvert_{\max} \cdot T$	38.93	32.52	34.26	36.79	37.62	37.06	33.5
Aire	2.65π	3.79π	4.23π	4.23π	4.9π	4.9π	3.99π
J	0.892	0.923	0.914	0.923	0.956	0.958	0.825

TABLE 6.2 – Propriétés des champs de contrôle de la figure 6.4. N_θ et N_C sont respectivement les nombres de paramètres θ_n et C_n choisis. N_{tot} est la somme des deux. Nous avons ajouté dans ce tableau la solution (6.39) calculée dans la section précédente, prise comme condition initiale avant l'optimisation. La valeur de la fidélité J est calculée suivant l'équation (6.42), sur la fenêtre d'optimisation montrée sur la figure 6.2, i.e. $\delta \cdot T \in [-20, 20]$, $\alpha \in [-0.5, 0.5]$.

La figure 6.4 et le tableau 6.2 suggèrent qu'en augmentant le nombre de paramètres, le programme va chercher des solutions plus énergétiques, i.e. d'aire plus grande. Ceci permet d'améliorer la robustesse par rapport à α, ce qui se voit bien sur les figures. L'aire tend vers une limite de 5π, ce qui est dû à la contrainte que l'on a imposée dans l'algorithme. On remarque aussi que le profil de fidélité est à peine meilleur avec 36 paramètres (figure (f)) qu'avec 8 paramètres (figure (e)). Les champs de contrôle correspondants sont très

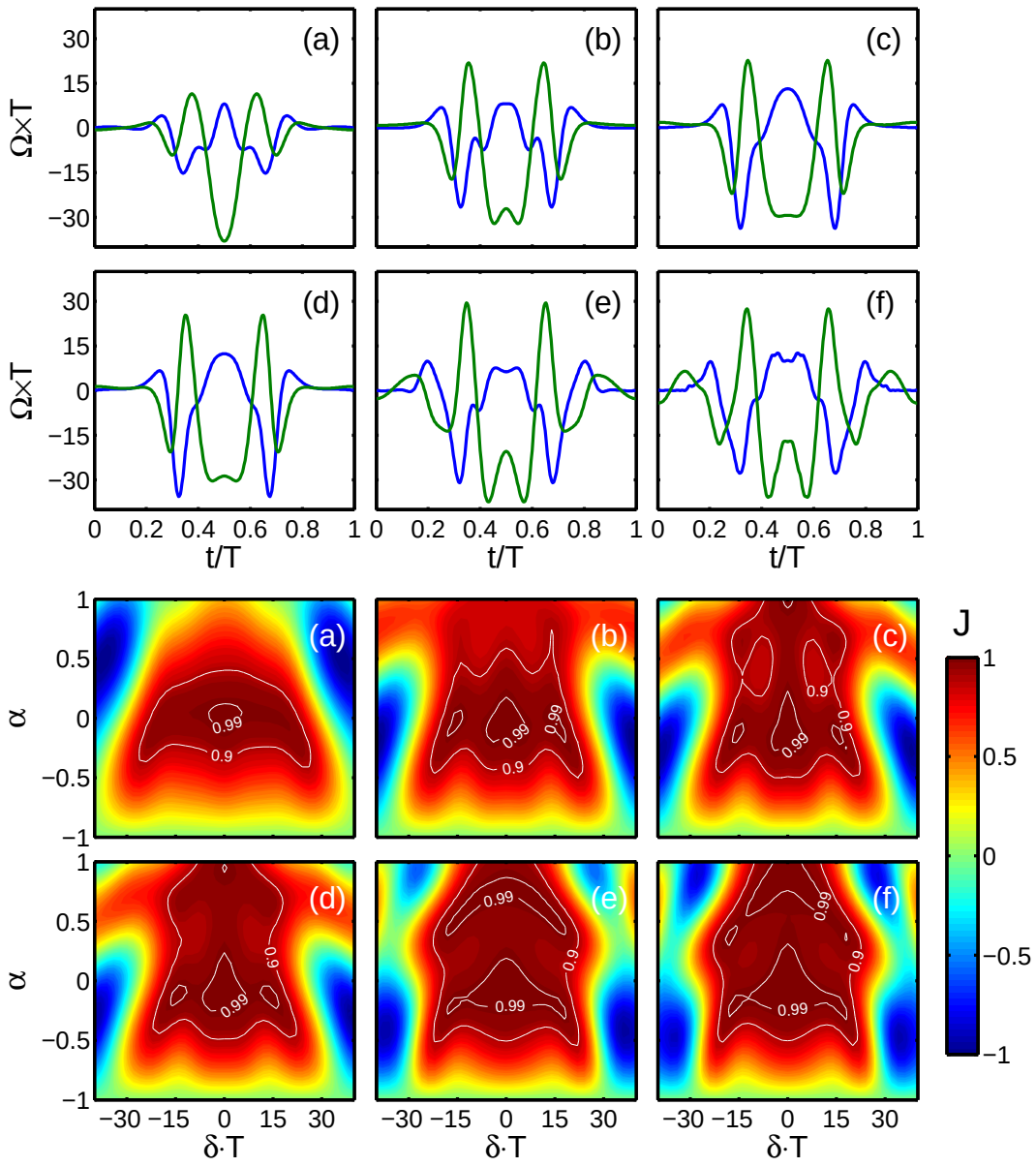

FIGURE 6.4 – *En haut*: Composante $\Omega_x(t)$ (en bleu) et $\Omega_y(t)$ (en vert) du pulse selon le nombre de paramètres optimisés. *En bas:* Profils de fidélité dans le plan (δ, α) correspondant. Le nombre de paramètres et les caractéristiques des champs sont donnés dans le tableau 6.2.

similaires. Ceci suggère qu'il est inutile de choisir un nombre élevé de paramètres et que dans ce cas, il est pertinent de n'en choisir que 8. Les 8 paramètres de la solution (e) sont donnés dans le tableau 6.3.

Pour vérifier si la solution (e) est efficace, nous allons l'optimiser avec un algorithme GRAPE standard. On rappelle que pour un temps discrétisé en N pas de la forme $t = \{t_1 \cdots t_N\}$, l'algorithme GRAPE standard optimise chacun des $\Omega_x(t_n)$ et $\Omega_y(t_n)$. On prend $N = 700$, soit un total de 1400 paramètres à optimiser. On part du champ de la figure (e), puis on optimise chaque $\vec{\Omega}(t_n)$. Le résultat est donné sur la figure 6.5. On remarque

Solution (e), 8 paramètres	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4
	-0.2513	-0.1162	-0.0382	-0.0863
	C_1	C_2	C_3	C_4
	2.6678	-2.0558	0.0261	-0.0051

TABLE 6.3 – Coefficients θ_n et C_n correspondants à la solution (e) de la figure 6.4.

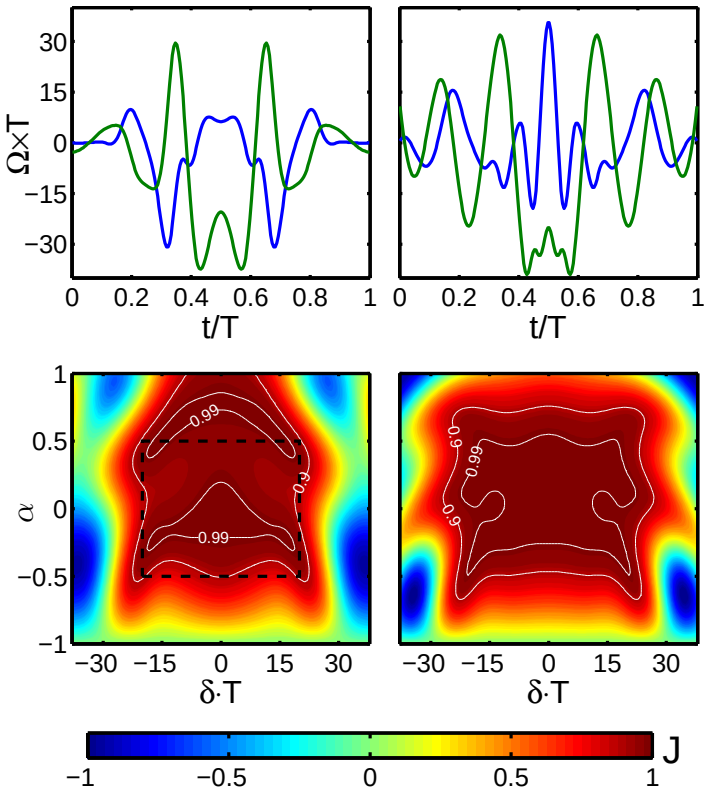

FIGURE 6.5 – *En haut*: Champs de contrôle associés à la solution (e) à 8 paramètres (à gauche), et optimisés par l'algorithme GRAPE standard (à droite). *En bas*: Profil de fidélité correspondant. Le rectangle en pointillés encadre la zone optimisée.

que les champs de contrôle sont assez différents, mais que la structure globale du profil de fidélité reste comparable. L'algorithme ramène toute la zone robuste dans la fenêtre d'optimisation, mais le profil est un peu moins bon pour $\alpha > 0.5$. Les caractéristiques du pulse sont données dans le tableau 6.4.

Solution	$\lvert\Omega_{\max}\rvert \cdot T$	Aire	J
GRAPE	43.4816	4.9π	0.986

TABLE 6.4 – Propriété du champ de contrôle obtenu avec l'algorithme GRAPE standard. La valeur de J est calculée sur la zone optimisée.

Un autre point à vérifier est le gain qu'apporte la solution par rapport à un π-pulse standard. Pour que la comparaison soit juste, on prend un π-pulse de même intensité

que l'intensité maximale atteinte par la solution (e), c'est-à-dire $I_\pi = |\Omega|_{\max}$. L'aire doit être égale à π. Il faut donc considérer un π-pulse d'autant plus court. Pour la solution à 8 paramètres, on a $|\Omega|_{\max} \cdot T = 37.62$. Pour la comparaison, on choisit un π-pulse d'intensité $I_\pi \cdot T = 37.62$ et de durée $T_\pi = (\pi/37.62)T = 0.0835\,T$. Le résultat est montré sur la figure 6.6.

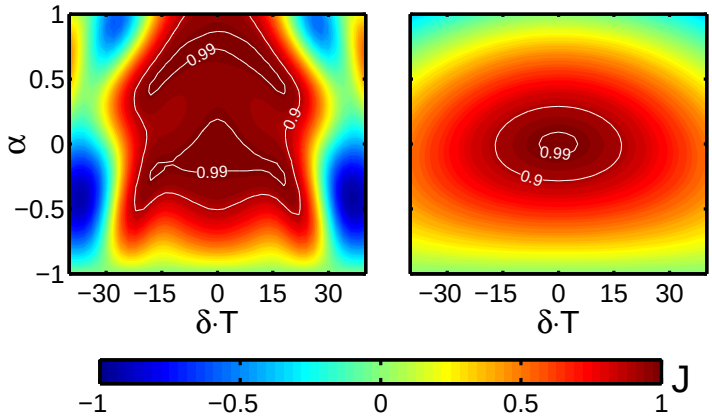

FIGURE 6.6 – Profil de fidélité de la solution à 8 paramètres (à gauche) et d'un π-pulse standard d'intensité $I_\pi \cdot T = 37.62$ de durée $T_\pi = 0.0835\,T$ (à droite). Le paramètre T dans les abscisses des deux figures correspond à la durée du pulse à 8 paramètres.

Nous avons considéré jusqu'à présent une fidélité moyenne sur l'ensemble de la fenêtre d'optimisation (Eq. (6.42)). L'algorithme a donc tendance à "aplatir" le profil de fidélité, de manière à augmenter globalement la fidélité moyenne, sans chercher des zones avec une très bonne précision. Or, comme nous l'avons vu en introduction, les applications expérimentales en information quantique nécessitent une erreur relative inférieure à 10^{-4} [18]. Afin d'augmenter la précision au centre de la figure, on définit une fidélité pondérée par une gaussienne de la forme:

$$J^G = \sum_{n=1}^{N_\alpha} \sum_{m=1}^{N_\delta} f(\alpha_n, \delta_m) \Re[\langle \lambda_{n,m}(T) | \lambda_0(T) \rangle], \tag{6.43}$$

avec $f(\alpha_n, \delta_m)$ une fonction gaussienne à deux dimensions définie de la façon suivante:

$$f(\alpha_n, \delta_m) = A e^{-\frac{\alpha_n^2}{2\sigma_\alpha^2} - \frac{\delta_m^2}{2\sigma_\delta^2}}, \quad A = \left(\sum_{n=1}^{N_\alpha} \sum_{m=1}^{N_\delta} e^{-\frac{\alpha_n^2}{2\sigma_\alpha^2} - \frac{\delta_m^2}{2\sigma_\delta^2}} \right)^{-1}. \tag{6.44}$$

On optimise sur une fenêtre plus petite telle que $\delta \cdot T \in [-5, 5]$ et $\alpha \in [-0.2, 0.2]$. On choisit $\sigma_\alpha = 0.2$ et $\sigma_\delta = 1.5$. Nous avons sélectionné un champ de contrôle à 10 paramètres, dont les propriétés sont données dans le tableau 6.5. Le profil de robustesse correspondant est montré sur la figure 6.7.

Que les coefficients soient optimisés pour une fidélité du type (6.42) ou gaussienne (Eq. (6.43)), on observe que la structure du profil de fidélité a toujours cette forme "pincée" le long de la droite $\alpha \simeq 0$ et est très robuste par rapport à α. Cela suggère que la

C_1	C_2	C_3	C_4	C_5			
2.0134	-2.3337	0.0868	0.1757	-0.9177	Aire	J^G	$\|\Omega\|_{\max}$
θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5	6.04π	0.999923	38.23
0.1574	0.1102	0.0437	0.0150	-0.0108			

TABLE 6.5 – Paramètres du pulse optimisé avec une fidélité gaussienne. La fidélité J^G est calculée selon la formule (6.43) sur la fenêtre d'optimisation $\delta \cdot T \in [-5, 5]$ et $\alpha \in [-0.2, 0.2]$.

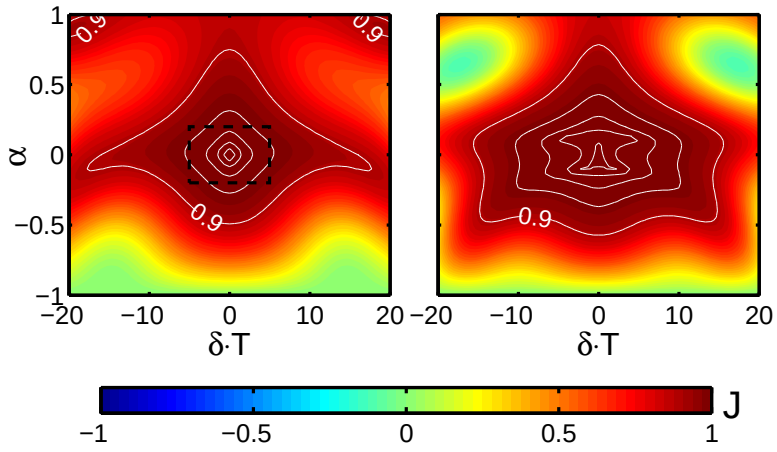

FIGURE 6.7 – Profil de fidélité de la solution analytique robuste au deuxième ordre (à gauche) et de la solution optimisée avec 10 paramètres du tableau 6.5. Le rectangle en pointillés correspond à la région optimisée. Les contours sont des lignes de niveaux pour lesquelles, de la plus interne à la plus externe, on a une erreur de 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2} et 10^{-1} (la fidélité est donnée par $J = 1-$erreur). Le profil de J est évalué sur une plage de δ plus petite qu'auparavant pour mettre en valeur la structure des lignes de niveau.

paramétrisation est bien adaptée pour améliorer la robustesse par rapport à α, mais moins pour celle par rapport à δ. Il semble que la robustesse par rapport à α soit purement due à la forme du champ de contrôle, étant donné qu'elle ne nécessite pas une aire élevée ($A \simeq 4 - 5\pi$).

6.4 Application expérimentale

6.4.1 Choix du champ de contrôle

Nous avons réalisé ce travail en collaboration avec des chercheurs du groupe de T. Halfmann, de l'Institut de Physique Appliquée à Darmstadt (Allemagne). Ils ont implémenté expérimentalement un pulse que nous avons calculé, afin de montrer l'efficacité expérimentale de la méthode. Le pulse a été optimisé dans une région $\delta \cdot T \in [-14, 14]$ et $\alpha \in [-0.5, 0.5]$, avec une contrainte sur les bords du champ de la forme $\Omega_x(0) = \Omega_y(0) =$

$\Omega_x(T) = \Omega_y(T) = 0$, pour satisfaire des contraintes expérimentales. Nous avons sélectionné un pulse dépendant de 8 paramètres libres, 5 C_n et 3 θ_n, en plus d'un paramètre contraint de sorte que les conditions aux bords soient satisfaites. La contrainte est expliquée dans la section 6.6. Les paramètres du pulse sont donnés dans le tableau 6.6. Le

C_1	C_2	C_3	C_4	C_5			
2.3347	-1.9450	0.3944	-0.1139	-0.3723	Aire	J	$\lvert\Omega\rvert_{\max}$
θ_1	θ_2 (contraint)	θ_3	θ_4		5.06π	0.96	38.06
-0.0990	-0.1176	-0.0394	-0.0119				

TABLE 6.6 – Paramètres du pulse expérimental. Le paramètre θ_2 est contraint de manière à ce que le champ de contrôle soit nul aux instants $t = 0$ et $t = T$. La fidélité J est calculée sur la fenêtre d'optimisation, c'est-à-dire $\delta \cdot T \in [-14, 14]$ et $\alpha \in [-0.5, 0.5]$.

champ de contrôle et le profil de robustesse sont donnés sur la figure 6.8. On remarque que

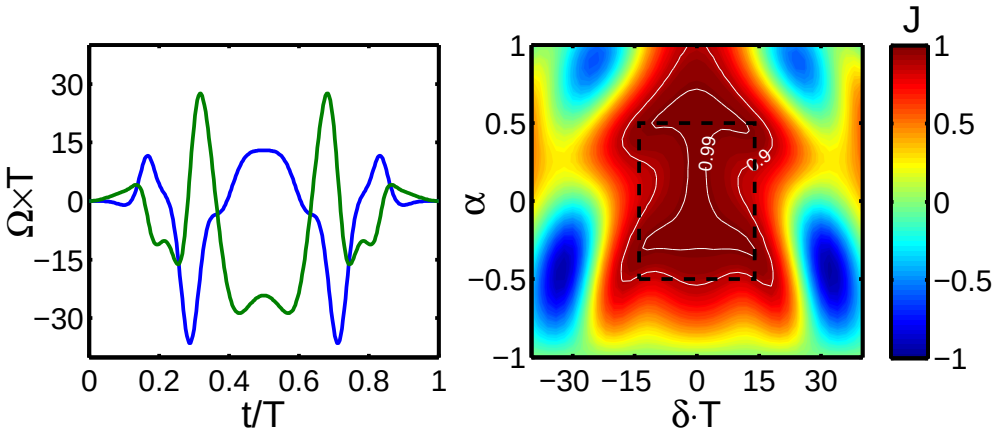

FIGURE 6.8 – *A gauche:* Champ de contrôle utilisé pour l'expérience. La courbe bleue correspond à Ω_x et la verte à Ω_y. Les paramètres du pulse sont donnés dans le tableau 6.6. *A droite:* Profil de robustesse correspondant. Le rectangle en pointillés entoure la région optimisée.

globalement, le profil de robustesse est moins bon que celui de la solution à 8 paramètres de la section précédente. Cependant, il est meilleur par rapport à α, i.e. le long de la droite d'équation $\delta = 0$. Au moment où nous avons obtenu ce résultat, nous n'avions pas essayé de prendre une fenêtre d'optimisation plus grande, ce qui explique la faible robustesse par rapport à δ. On voit que par rapport au π-pulse de la figure 6.6, d'intensité très similaire, l'optimisation n'améliore que très peu la robustesse par rapport à δ.

6.4.2 Réalisation expérimentale

L'efficacité d'une porte NOT peut être mesurée par la méthode dite de "spin echo". Cette méthode se comprend facilement dans les coordonnées de Bloch. On considère un ensemble de spins avec différentes inhomogénéités δ. Tous ces spins sont initialement au pôle nord de sphère de Bloch. On applique un pulse d'excitation sur le système de sorte que tous les spins soient transférés sur un point de l'équateur de la sphère de Bloch, par exemple sur l'axe $\vec{e}_1$. On laisse alors le système évoluer librement pendant un temps τ_ℓ. Pendant cette période, chaque spin est influencé uniquement par son offset δ, qui implique une rotation autour de l'axe $\vec{e}_3$ de la sphère de Bloch. Par conséquent, tous les spins se dispersent sur l'équateur. Ensuite, on applique un pulse NOT (dans notre cas celui du tableau 6.6), ce qui implique que tous les spins vont effectuer une rotation de π autour de l'axe $\vec{e}_2$, à condition que le pulse soit robuste par rapport à δ. On laisse à nouveau le système évoluer librement, sous l'influence de δ, pendant un temps τ_ℓ. Si le pulse est efficace, tous les spins se seront regroupés le long de l'axe $-\vec{e}_1$ au temps $t = 2\tau_\ell + T$, où T est la durée du pulse. Ce processus est illustré sur la figure 6.9.

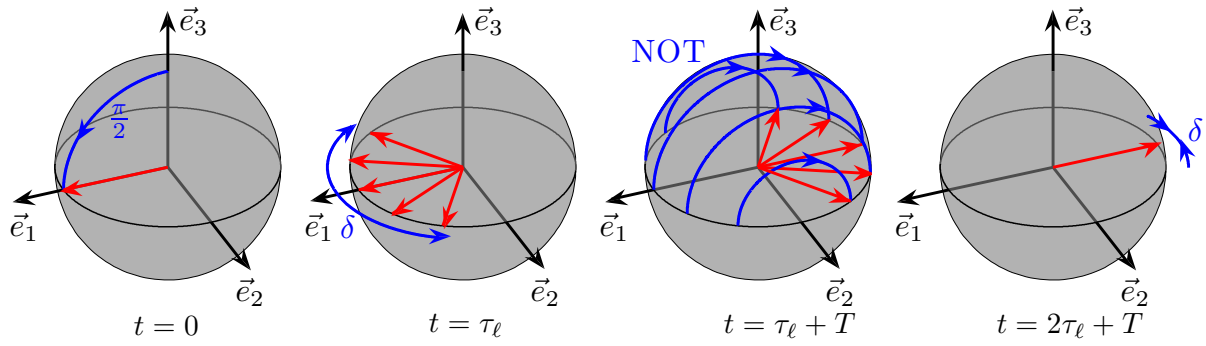

FIGURE 6.9 – Schéma idéal du processus d'écho de spin. A l'instant $t = 2\tau_\ell + T$, tous les spins sont en phase et le signal est maximum. C'est à cet instant que l'on fait une mesure du système.

Si le pulse n'est pas robuste par rapport aux inhomogénéités α, alors les spins effectueront une rotation supérieure ou inférieure à π (suivant le signe de α) autour de l'axe $\vec{e}_2$ et ne se regrouperont pas comme prévu. L'effet des inhomogénéités est illustré sur la figure 6.10.

L'expérience a été réalisée sur un cristal de Pr^{3+}:Y_2SiO_5. L'ion Pr^{3+} est caractérisé dans ce modèle par un état fondamental ${}^3H_4$ et un état excité ${}^1D_2$. La longueur d'onde de transition est de 605.98 nm. La transition est produite par un laser solide de longueur d'onde accordable, dont la largeur à mi-hauteur du faisceau est de 60 kHz. Chaque état électronique possède trois états hyperfins deux fois dégénérés. La structure du système est montrée sur la figure 6.11. Les deux niveaux d'énergie qui nous intéressent sont ${}^3H_4\,|\pm\frac{3}{2}\rangle$ ($|1\rangle$) et ${}^3H_4\,|\pm\frac{3}{2}\rangle$ ($|2\rangle$), qui correspondent respectivement au pôle nord et au pôle sud de la sphère de Bloch. Les transitions entre ces deux états sont contrôlées par des impulsions

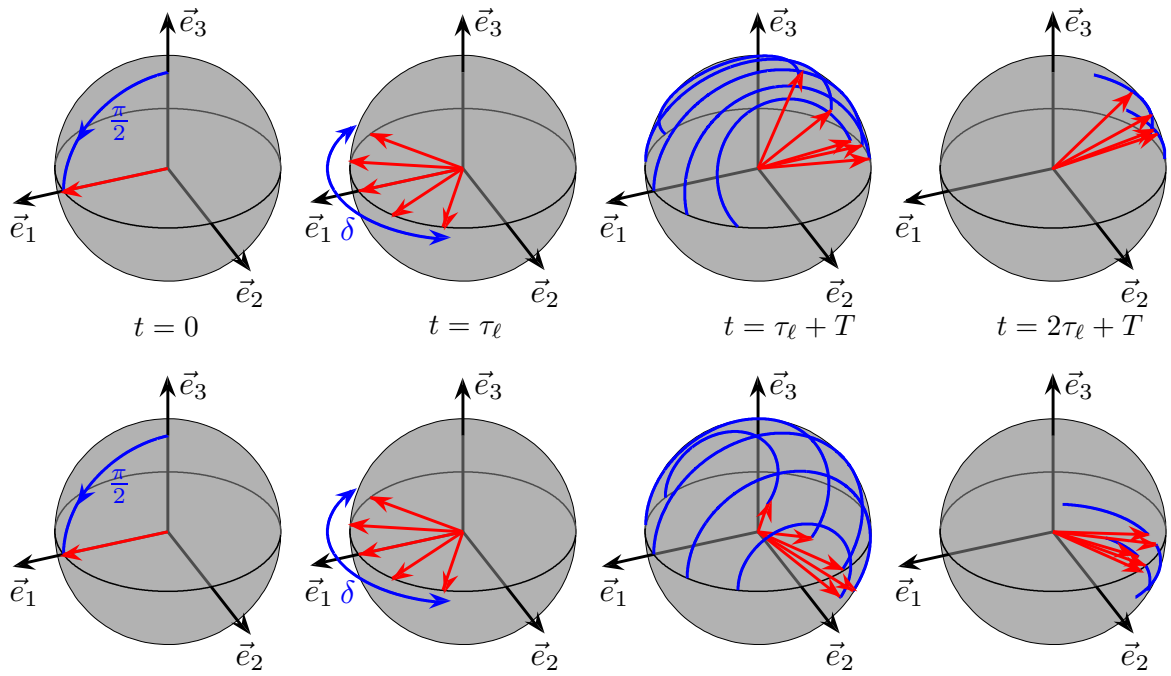

FIGURE 6.10 – *En haut:* Effet des inhomogénéités δ sur la porte NOT. *En bas:* Effet des inhomogénéités α. Si le contrôle n'est pas robuste par rapport aux inhomogénéités, alors à l'instant $t = 2\tau_\ell + T$, les spins sont dispersés au lieu de se regrouper en un point unique. On suppose que le pulse d'excitation $\pi/2$ est infiniment robuste.

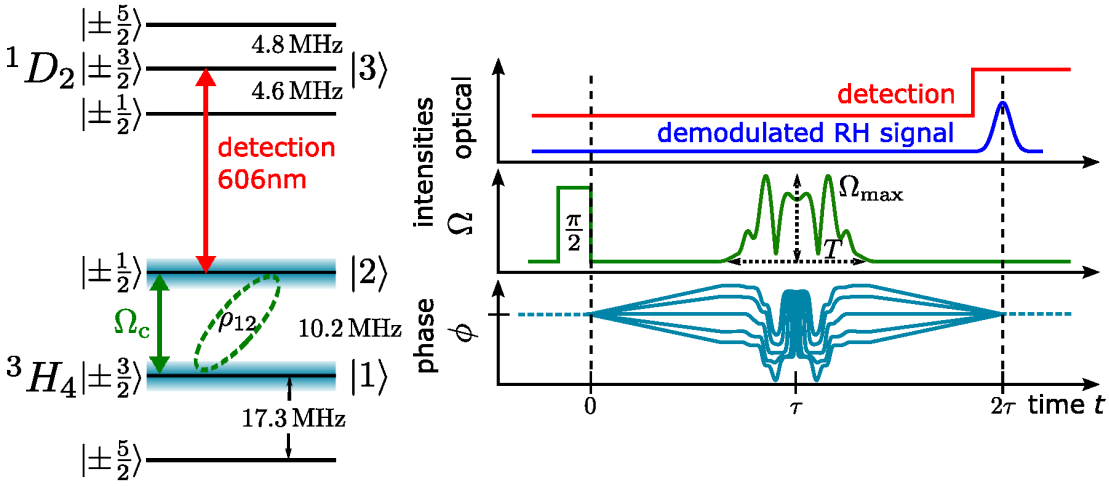

FIGURE 6.11 – *A gauche:* Structure hyperfine du Pr^{3+}:Y_2SiO_5. Les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$ correspondent au pôle nord et au pôle sud de la sphère de Bloch, respectivement. *A droite:* Séquence effectuée pour le processus d'écho de spin. La mesure est effectuée à l'instant $t = 2\tau$. La phase ϕ correspond à l'angle azimutal de chaque spin sur la sphère de Bloch.

radiofréquences, produites par un générateur qui permet de choisir la forme de l'onde (Tektronix AWG 5014) relié à une bobine proche de l'échantillon.

Dans un premier temps, tous les atomes sont préparés dans l'état $|1\rangle$, grâce à une

séquence de préparation basée sur un pompage optique [144, 145]. Puis, on applique au système un pulse d'excitation $\pi/2$ avec une fréquence de 10.2 MHz et une durée de 4 μs. Ce pulse a pour but de générer une cohérence entre les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$, c'est-à-dire, dans la représentation de Bloch, d'envoyer tous les spins simultanément sur le point de l'équateur $(1, 0, 0)$ de la sphère de Bloch. Chaque spin évolue ensuite librement, suivant la valeur de son offset δ. Le pulse NOT est centré à $\tau = 150$ μs, comme le montre la figure 6.11. On rappelle que ce pulse doit réaliser une rotation de π autour de l'axe $\vec{e}_2$ de la sphère de Bloch, ce qui a pour effet de rassembler les spins sur le point $(-1, 0, 0)$ à l'instant $t = 2\tau = 300$ μs. En comparaison, le temps de déphasage dans le cristal Pr^{3+}:Y_2SiO_5 est de l'ordre de $10\mu s$ [146, 147]. Le système est mesuré par RHD (Raman Heterodyne Detection) [144] à l'instant $t = 2\tau$. La robustesse par rapport à α peut être évaluée de deux manières différentes: soit en modifiant l'amplitude du contrôle, soit en modifiant sa durée T. En théorie, ces deux méthodes sont parfaitement équivalentes car on peut passer de l'une à l'autre en faisant une renormalisation du temps. En pratique, une trop forte intensité peut impliquer des erreurs expérimentales. Pour cette raison, nous avons évalué la robustesse de la porte NOT dans le plan $(|\Omega|_{\max}, T)$. Ce phénomène est visible sur la

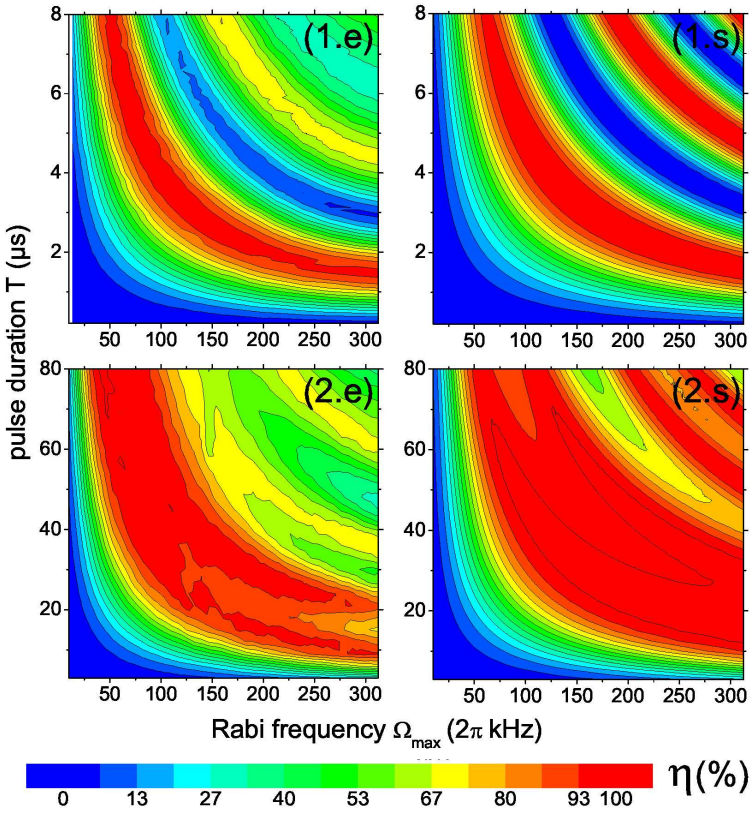

FIGURE 6.12 – Fidélité après le processus d'écho de spin pour un π- pulse constant (en haut) et pour le pulse NOT optimisé (en bas). Les figures (1.e) et (2.e) sont les résultats expérimentaux, et les figures (1.s) et (2.s) les résultats obtenus en simulation numérique. Remarquons le désaccord entre l'expérience et la simulation lorsque $|\Omega|_{\max}$ est intense (visible en haut à droite des figures).

figure 6.12, pour des fortes valeurs de $\Omega_{\max}$. On voit nettement sur cette figure l'avantage du pulse optimisé, robuste sur une plage de valeurs beaucoup plus grande.

Dans une seconde expérience, nous avons évalué la robustesse du rephasage après l'écho de spin en fonction de δ et de la durée du pulse T. Dans cette expérience, le paramètre $\Omega_{\max}$ est fixé à $2\pi \cdot 125$ kHz. Comme dans l'expérience précédente, les résultats sont comparés avec ceux d'un π-pulse standard, ainsi qu'à une simulation numérique. Les résultats sont montrés sur la figure 6.13. On remarque que les résultats théoriques et expérimentaux

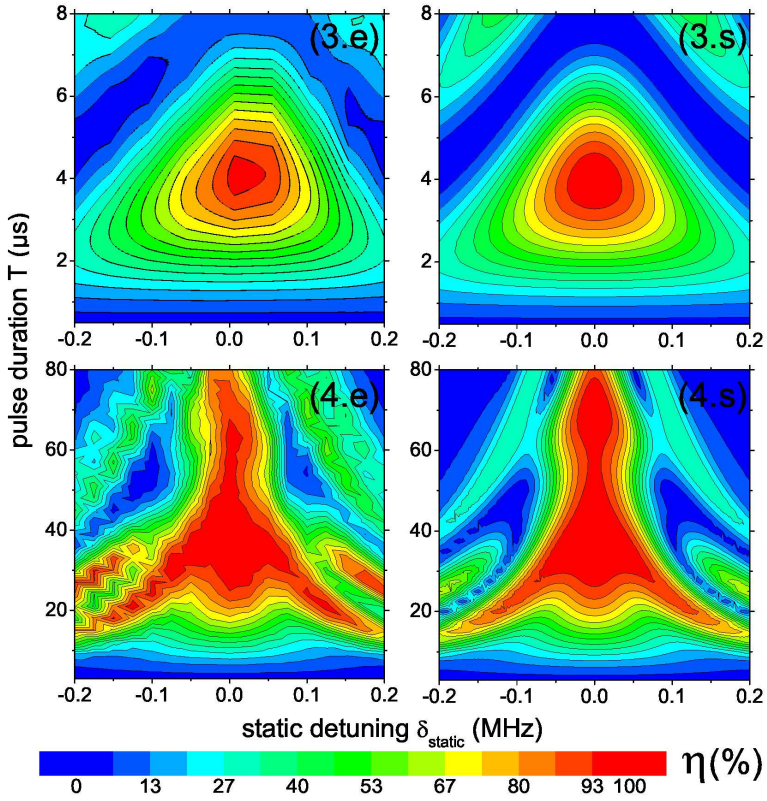

FIGURE 6.13 – Rendement après le processus d'écho de spin pour un π- pulse standard (en haut) et pour le pulse NOT (en bas) dans le plan (δ, T). Les figures (3.e) et (4.e) sont les résultats expérimentaux. Les figures (3.s) et (4.s) sont les résultats obtenus en simulation numérique.

sont en très bon accord. Comme nous l'avons dit au début de cette section, on voit que le réel avantage du pulse optimisé concerne sa robustesse par rapport à α, qui est reliée à la robustesse par rapport à T sur cette figure.

6.5 Optimisation de pulses composites

La méthode des pulses composites consiste, elle aussi, à décomposer les champs de contrôle dans une base de paramètres qui permet de pouvoir contrôler analytiquement dans une certaine mesure la robustesse d'un transfert. L'idée est de décomposer le champ

$\vec{\Omega}$ en N pulses constants qui ont la même aire, la même intensité et la même durée, mais des phases différentes. Un pulse composite est donc composé de N pulses $\vec{\Omega}_k$ d'aire π et de durée T_p définis de la façon suivante:

$$\Omega_{x,k} = \frac{N\pi}{T}\cos\phi_k, \quad \Omega_{y,k} = \frac{N\pi}{T}\sin\phi_k, \tag{6.45}$$

où $T = NT_p$ est la durée totale du pulse. Pendant une durée T_p, l'équation de Schrödinger en présence des inhomogénéités est de la forme:

$$i\hbar\partial_t \left|\lambda_{\alpha,\beta}\right\rangle = H_n \left|\lambda_{\alpha,\beta}\right\rangle, \tag{6.46}$$

où l'opérateur H_n est donné par:

$$H_n = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \delta & Ae^{-i\phi_n} \\ Ae^{i\phi_n} & -\delta \end{pmatrix}, \tag{6.47}$$

avec $n \in \{1, 2, \cdots, N\}$. La solution de cette équation est alors $|\lambda(T_p)\rangle = e^{-iH_nT_p}|\lambda(t_0)\rangle$. Après N pulses constants appliqués successivement, l'état du système est de la forme:

$$|\lambda(T)\rangle = U(\phi_N)U(\phi_{N-1})\cdots U(\phi_1)\left|\lambda(0)\right\rangle, \tag{6.48}$$

où $U(\phi_n) = e^{-iH_nT_p}$.

La méthode est la même que celle du SSSP, dans le sens où elle consiste à calculer les phases ϕ_n de façon à annuler les dérivées de la fidélité au point $(\alpha, \delta) = (0, 0)$, jusqu'à l'ordre voulu. Nous ne détaillerons pas les calculs, car ils ont été faits par J. A. Jones en 2013 [87], précisément pour une porte NOT. Nous nous servirons directement de ses résultats. Remarquons que cette méthode ne cherche pas à optimiser la forme du pulse, qui est constant par morceau, contrairement à la méthode SSSP. Cependant, elle a l'avantage de contrôler très simplement l'aire et l'intensité du pulse, qui s'expriment sous la forme:

$$A = \sum_{k=1}^{N}\int_0^{T_p}\sqrt{\Omega_{x,k}^1 + \Omega_{y,k}^2}dt = N\pi, \quad |\Omega|_{\max}\cdot T = |\Omega|\cdot T = N\pi. \tag{6.49}$$

Pour réaliser une porte NOT, le nombre N de phases doit être impair. Dans les figures qui vont suivre, les figures de robustesse auront comme abscisse $\delta/|\Omega|_{\max}$, car $|\Omega|_{\max}$ étant fixé par le nombre de pulses N, nous ne pouvons pas le contraindre à garder la même valeur tout en changeant le nombre de paramètres. Dans un premier temps, on compare la solution SSSP à 8 paramètres (solution (e) du tableau 6.2) avec un pulse composite de même aire, c'est-à-dire $A = 5\pi$, que l'on optimise numériquement. Les conditions initiales du pulse composite, c'est-à-dire les phases ϕ_n initiales, sont celles calculées par Jones. Elles sont données dans le tableau 6.7. La figure de robustesse correspondante est donnée sur la figure 6.14, ainsi que la fenêtre d'optimisation.

Pour que la méthode d'optimisation soit la même qu'avec le SSSP, la fenêtre d'optimisation est choisie de façon à ce que $\delta \in [-|\Omega|_{\max}/2, |\Omega|_{\max}]$ et $\alpha \in [-0.5, 0.5]$. On rappelle

ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4	ϕ_5
240°	210°	300°	210°	240°

TABLE 6.7 – Phases du pulse composite composé de $N = 5$ π-pulses calculées par Jones [87].

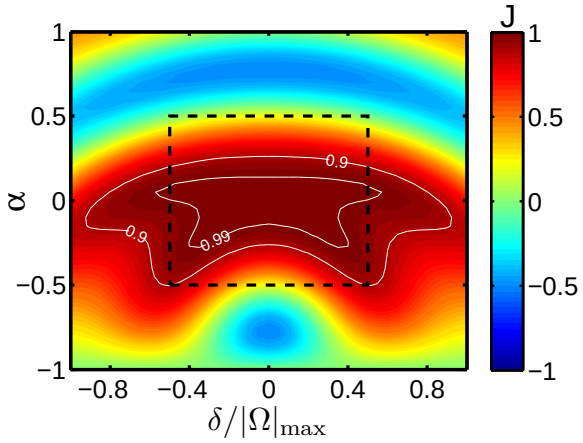

FIGURE 6.14 – Figure de robustesse du pulse composite détaillé dans le tableau 6.7. Le rectangle en pointillés correspond à la fenêtre d'optimisation, qui est telle que $\delta \in [-|\Omega|_{\max}/2, |\Omega|_{\max}]$ et $\alpha \in [-0.5, 0.5]$. En moyenne, dans le rectangle, on a $\bar{J} = 0.82$.

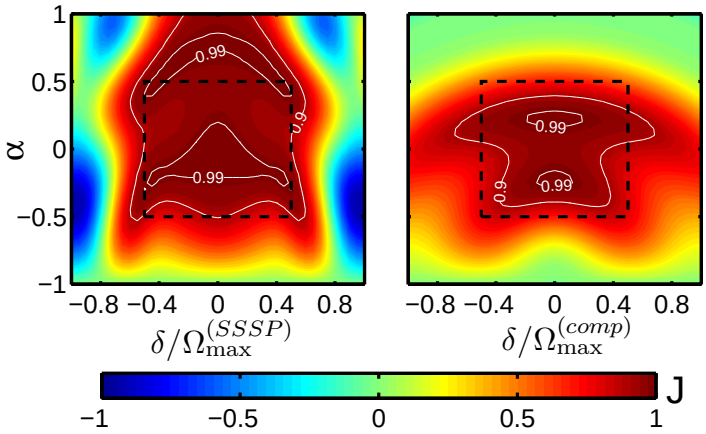

FIGURE 6.15 – Profil de robustesse du pulse SSSP à 8 paramètres (à gauche) et du pulse composite optimisé (à droite). Les zones optimisées numériquement sont comprises dans les rectangles en pointillés. Dans cette zone, on a en moyenne $\bar{J}_{sssp} = 0.96$ et $\bar{J}_{comp} = 0.90$.

que pour le SSSP, on avait $|\Omega|_{\max} \sim 38T$ et que la fenêtre d'optimisation était telle que $\delta \in [-20/T, 20/T] \simeq [-|\Omega|_{\max}/2, |\Omega|_{\max}/2]$. Le résultat est donné sur la figure 6.15.

Bien que pour le pulse composite, la fidélité moyenne soit meilleure sur la fenêtre d'optimisation que sur la figure 6.14, le profil semble moins intéressant après optimisation.

	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4	ϕ_5	ϕ_6	ϕ_7
Initial	252.5°	265°	97.5°	170°	97.5°	265°	252.5°
Optimal	248.3°	273.2°	107.4°	172.8°	107.4°	273.2°	248.3°

TABLE 6.8 – Phases du pulse composite avec $N = 7$ avant et après optimisation.

L'algorithme a permis d'augmenter la robustesse par rapport à α, au détriment de celle en δ. Cela suggère que la fenêtre d'optimisation n'est pas adéquate pour ce pulse composite 5π, qui semble plus adapté pour améliorer la robustesse par rapport à δ.

On optimise maintenant le résultat de Jones pour un pulse composite composé de $N = 7$ π-pulses. Les paramètres avant et après optimisation sont donnés dans le tableau 6.8 et les profils de robustesse sur la figure 6.16.

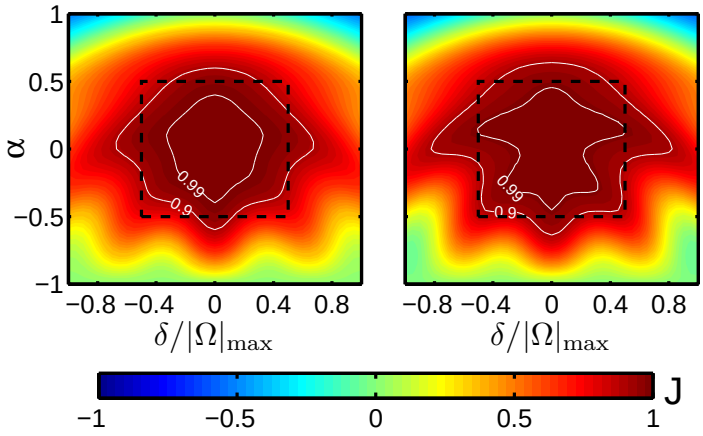

FIGURE 6.16 – Profil de robustesse d'un pulse composite 7π obtenu par Jones [87] (à gauche), et après optimisation des phases (à droite). A gauche, la fidélité moyenne sur la fenêtre d'optimisation est de $\bar{J} = 0.95$, contre $\bar{J} = 0.97$ pour la figure de droite.

Enfin, on peut comparer l'efficacité des deux méthodes pour obtenir une fidélité maximale au centre de la figure. Les phases calculées dans l'article [87] sont déjà optimisées pour cela, car les dérivées du profil de fidélité sont nulles au centre de la figure. Une optimisation numérique en prenant une fidélité gaussienne (Eq. (6.43)) suggère que l'optimisation est inutile pour ce problème précis. Les phases ne varient que très peu, ce qui peut être dû au fait que l'on n'optimise qu'un nombre fini de points dans le plan (α, δ) et que par conséquent le choix de la grille de points peut légèrement modifier la solution. On compare donc la robustesse de la solution initiale du tableau 6.8 avec la solution SSSP du tableau 6.5. Le résultat est donné sur la figure 6.17.

Les deux méthodes sont très comparables. Il est difficile de dire si l'une est meilleure que l'autre. Notons que globalement, les pulses composites sont plus robustes par rapport aux inhomogénéités δ, mais moins vis-à-vis des inhomogénéités α, contrairement à la

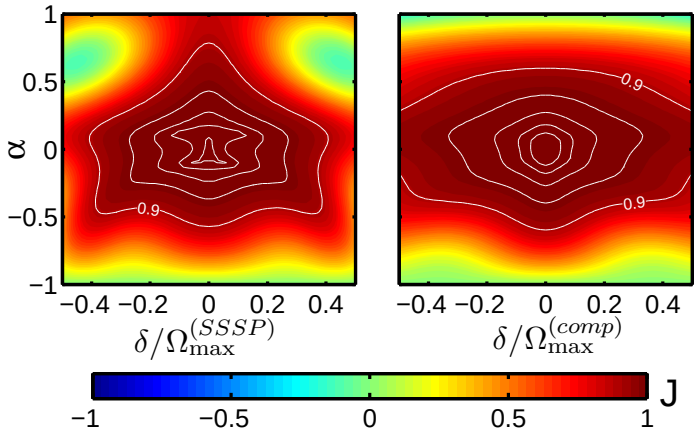

FIGURE 6.17 – Profil de robustesse du pulse SSSP du tableau 6.5 (à gauche) et de la solution composite à 7 phases calculée par Jones (à droite).

méthode SSSP.

6.6 Algorithme

L'optimisation numérique est basée sur l'algorithme GRAPE (section 2.5 du chapitre 2). Il consiste à optimiser le transfert d'un ensemble de $N_\alpha \times N_\delta$ spins, tous contrôlés par le même champ de contrôle $\vec{\Omega} = \Omega_x \vec{u}_x + \Omega_y \vec{u}_y$. Chaque spin est associé à un couple de valeurs (α, δ) d'inhomogénéités. A l'instant $t = 0$, tous les spins sont dans l'état $|\lambda(0)\rangle = {}^t(1, 0)$. Ils doivent tous être transférés vers un état cible $|\lambda_c\rangle = {}^t(0, -1)$. On rappelle qu'un champ de contrôle $\vec{\Omega}(t)$ est associé à un jeu de paramètres θ_n et C_n. Pour un champ de contrôle donné, chaque spin (n, m) (associé à (α_n, δ_m)) est, à l'instant final, dans un état $|\lambda_{n,m}(T)\rangle$ plus ou moins éloigné de l'état cible. A chaque itération, l'algorithme modifie les paramètres θ_n et C_n de sorte que l'ensemble des spins soit globalement plus proche de l'état cible, c'est-à-dire de sorte que la fidélité de l'équation (6.42) augmente. Avant l'optimisation, les coefficients θ_n et C_n sont initialisés de la façon suivante:

$$\begin{aligned} \{C_1, \cdots, C_N\} &= \{2, -1.735, 0, \cdots, 0\}, \\ \{\theta_1, \cdots, \theta_M\} &= \{-0.174, -0.163, 0, \cdots, 0\}. \end{aligned} \tag{6.50}$$

A chaque itération, l'algorithme procède de la façon suivante:

$$\begin{aligned} C_n^{(i+1)} &= C_n^{(i)} + \epsilon \frac{\partial J}{\partial C_n} \\ \theta_n^{(i+1)} &= \theta_n^{(i)} + \epsilon \frac{\partial J}{\partial \theta_n}, \end{aligned} \tag{6.51}$$

où (i) désigne l'itération (i). On considère ici seulement une méthode du premier ordre. Le paramètre ϵ est choisi pour que l'algorithme converge de manière monotone et suffisamment rapide vers une valeur optimale $J_{\max}$.

Calcul des gradients

On rappelle que pour des fonctions paramétrées (cf. section 2.5 du chapitre 2), on développe les gradients sous la forme suivante:

$$\begin{aligned}\frac{\partial J}{\partial C_n} &= \sum_{k=1}^{N_t} \frac{\partial J}{\partial \Omega_x}\frac{\partial \Omega_x}{\partial C_n} + \frac{\partial J}{\partial \Omega_y}\frac{\partial \Omega_y}{\partial C_n}\bigg|_{t_k} \\ \frac{\partial J}{\partial \theta_n} &= \sum_{k=1}^{N_t} \frac{\partial J}{\partial \Omega_x}\frac{\partial \Omega_x}{\partial \theta_n} + \frac{\partial J}{\partial \Omega_y}\frac{\partial \Omega_y}{\partial \theta_n}\bigg|_{t_k},\end{aligned} \tag{6.52}$$

où N_t est le nombre de pas de temps. Les termes $\frac{\partial J}{\partial \Omega_{x,y}}|_{t_k}$ sont donnés par la méthode GRAPE standard expliquée dans la section 2.5 du chapitre 2. Pour les résultats concernant la précision à 10^{-4} et pour les pulses composites, ces termes sont calculés en utilisant un développement de Taylor du gradient, qui est expliqué dans la même section. Les termes $\frac{\partial \Omega_{x,y}}{\partial C_k}$ et $\frac{\partial \Omega_{x,y}}{\partial \theta_k}$ s'expriment analytiquement à l'aide des équations (6.8), (6.32), (6.34) et (6.40). On a:

$$\frac{\partial \Omega_x}{\partial C_n} = \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial C_n}\sin\theta\cos\chi + \frac{\partial \chi}{\partial C_n}\Omega_y \quad \frac{\partial \Omega_y}{\partial C_n} = -\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial C_n}\sin\theta\sin\chi - \frac{\partial \chi}{\partial C_n}\Omega_x \tag{6.53}$$

et:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Omega_x}{\partial \theta_n} &= \frac{\partial \dot{\theta}}{\partial \theta_n}\sin\chi + \dot{\gamma}\frac{\partial \theta}{\partial \theta_n}\cos\theta\cos\chi + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \theta_n}\sin\theta\cos\chi + \frac{\partial \chi}{\partial \theta_n}\Omega_y, \\ \frac{\partial \Omega_y}{\partial \theta_n} &= \frac{\partial \dot{\theta}}{\partial \theta_n}\cos\chi - \dot{\gamma}\frac{\partial \theta}{\partial \theta_n}\cos\theta\sin\chi - \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \theta_n}\sin\theta\sin\chi - \frac{\partial \chi}{\partial \theta_n}\Omega_x.\end{aligned} \tag{6.54}$$

Les variables nécessaires sont données par:

$$\begin{aligned}&\theta = \tfrac{\pi}{T}t + \textstyle\sum_{m=1}^{M}\theta_m \sin\left(\tfrac{2m\pi}{T}t\right), \qquad \dot{\theta} = \tfrac{\pi}{T} + \tfrac{2\pi}{T}\textstyle\sum_{m=1}^{M} m\theta_m \cos\left(\tfrac{2m\pi}{T}t\right), \\ &\gamma = \chi_i + 2\theta + \textstyle\sum_{n=1}^{N} C_n \sin(2n\theta), \quad \dot{\gamma} = 2\dot{\theta} + 2\dot{\theta}\textstyle\sum_{n=1}^{N} nC_n\cos(2n\theta), \\ &\chi = \chi_i + 2\sin\theta + \textstyle\sum_{n=1}^{N} nC_n\left[\frac{\sin[(2n+1)\theta]}{2n+1} + \frac{\sin[(2n-1)\theta]}{2n-1}\right].\end{aligned} \tag{6.55}$$

Les dérivées partielles par rapport à C_n sont de la forme:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial C_n} &= 2n\dot{\theta}\cos(2n\theta) \\ \frac{\partial \chi}{\partial C_n} &= n\left(\frac{\sin[(2n+1)\theta]}{2n+1} + \frac{\sin[(2n-1)\theta]}{2n-1}\right).\end{aligned} \tag{6.56}$$

Pour calculer les dérivées par rapport à θ_n, il est plus adapté d'utiliser le fait que:

$$\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \theta_n} = \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial \theta_n} + \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \dot{\theta}}\frac{\partial \dot{\theta}}{\partial \theta_n}, \quad \frac{\partial \chi}{\partial \theta_n} = \frac{\partial \chi}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial \theta_n}, \tag{6.57}$$

et de calculer chacun de ces termes. Ceux-ci sont donnés par:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\dot{\gamma}}{\partial\theta} &= -4\dot{\theta}\sum_{k=1}^{N} k^2 C_k \sin(2k\theta) \\
\frac{\partial\dot{\gamma}}{\partial\dot{\theta}} &= 2 + 2\sum_{k=1}^{N} C_k \cos(2k\theta) \\
\frac{\partial\chi}{\partial\theta} &= 2\cos\theta + 2\sum_{k=1}^{N} kC_k \cos(2k\theta)\cos\theta \\
\frac{\partial\theta}{\partial\theta_n} &= \sin\left(\frac{2n\pi}{T}t\right) \\
\frac{\partial\dot{\theta}}{\partial\theta_n} &= \frac{2n\pi}{T}\cos\left(\frac{2n\pi}{T}t\right).
\end{aligned} \tag{6.58}$$

On a ainsi le matériel nécessaire pour calculer les gradients utilisés dans l'algorithme.

Propagation de l'état et de l'état adjoint

Afin de connaître l'état final de chaque spin $|\lambda_{n,m}(T)\rangle$, on propage pas à pas l'état de chaque spin suivant la formule:

$$|\lambda_{n,m}(t+dt)\rangle = e^{-iH_{n,m}(t)dt}\,|\lambda_{n,m}\rangle\,(t), \tag{6.59}$$

avec:

$$H_{n,m}(t) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \Omega_x - i\Omega_y \\ \Omega_x + i\Omega_y & \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\delta_m & \alpha_n(\Omega_x(t) - i\Omega_y(t)) \\ \alpha_n(\Omega_x(t) + i\Omega_y(t)) & \delta_m \end{pmatrix}. \tag{6.60}$$

Pour augmenter la vitesse de calcul, la matrice $e^{-iH_{n,m}(t)dt}$ est approximée par le produit $e^{-i\delta_m H_0 dt}e^{-i\alpha_n\Omega_x(t)H_1 dt}e^{-i\alpha_n\Omega_y(t)H_2 dt}$, avec (section 2.5 du chapitre 2):

$$H_0 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad H_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad H_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.61}$$

Les exponentielles de matrice peuvent alors s'exprimer analytiquement. Les expressions analytiques de ces exponentielles s'écrivent sous la forme:

$$\begin{aligned}
e^{-i\delta_m H_0 dt} &= \begin{pmatrix} e^{i\delta/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta_m/2} \end{pmatrix}, \\
e^{-i\alpha_n\Omega_x(t)H_1 dt} &= \begin{pmatrix} \cos(\alpha_n\Omega_x(t)dt) & -i\sin(\alpha_n\Omega_x(t)dt) \\ -i\sin(\alpha_n\Omega_x(t)dt) & \cos(\alpha_n\Omega_x(t)dt) \end{pmatrix} \\
e^{-i\alpha_n\Omega_y(t)H_2 dt} &= \begin{pmatrix} \cos(\alpha_n\Omega_y(t)dt) & -\sin(\alpha_n\Omega_y(t)dt) \\ \sin(\alpha_n\Omega_y(t)dt) & \cos(\alpha_n\Omega_y(t)dt) \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{6.62}$$

Pour les résultats concernant la précision à 10^{-4} et pour les pulses composites, $e^{-iH_{n,m}(t)dt}$ est développé en une série de Taylor de la forme:

$$e^{-iH_{n,m}(t)dt} = \sum_{k=1}^{K} \frac{(-idt)^k}{k!} H_{n,m}^k, \tag{6.63}$$

où K est l'ordre maximal de la série de Taylor que l'on choisit.

GRAPE nécessite aussi une propagation arrière de l'état adjoint. Dans notre cas, la fidélité pour le spin (n, m) étant donnée par $J_{n,m} = \Re \langle \lambda_{n,m}(T) | \lambda_c \rangle$, on propage l'état adjoint $|p_{n,m}\rangle$ en arrière suivant la formule:

$$\langle p_{n,m}(t - dt)| = \langle p_{n,m}(t)| \, e^{-iH(t)dt}, \tag{6.64}$$

avec la condition de transversalité:

$$|p_{n,m}(T)\rangle = |\lambda_c\rangle \, . \tag{6.65}$$

Structure de l'algorithme

L'algorithme se décompose de la manière suivante:

1. Initialisation des paramètres $\theta_n^{(i=0)}$ et $C_n^{(i=0)}$ suivant (6.50) et calcul du champ de contrôle correspondant.
2. A l'itération i, propagation en avant de l'état de chaque spin $|\lambda_{n,m}\rangle$ à partir de $|\lambda_{n,m}(0)\rangle = {}^t(1, 0)$, et en arrière de l'état adjoint $|p_{n,m}\rangle$ avec la condition $|p_{n,m}(T)\rangle = |\lambda_c\rangle = {}^t(0, -1)$.
3. Calcul des gradients $\partial J/\partial C_n$ et $\partial J/\partial \theta_n$ pour actualiser les paramètres et calcul du nouveau champ de contrôle suivant la formule (6.51).
4. Retour à l'étape 1 avec les nouveaux paramètres C_n et θ_n, en incrémentant i de 1.

Contraintes sur l'aire du contrôle

Pour éviter que l'aire du contrôle ne soit trop grande, on introduit le coût courant suivant:

$$J_A = \frac{\beta}{2T} \int_0^T (\Omega_x^2 + \Omega_y)^2 dt. \tag{6.66}$$

L'algorithme optimise alors une fidélité totale $J_{tot} = J - J_A$. Dans l'optimisation, cela se répercute uniquement dans le calcul des gradients $\partial J/\partial \Omega_{x,y}|_{t_k}$, qui deviennent de la forme:

$$\left.\frac{\partial J_{tot}}{\partial \Omega_{x,y}}\right|_{t_k} = \left.\frac{\partial J}{\partial \Omega_{x,y}}\right|_{t_k} - \frac{\beta}{T} \Omega_{x,y}|_{t_k}. \tag{6.67}$$

L'utilisation de l'algorithme suggère que cette contrainte limite aussi l'intensité du contrôle, ce qui est probablement dû au fait que ceux-ci sont paramétrés par quelques coefficients. Dans les calculs numériques, nous avons choisi la valeur du paramètre β à la main de sorte que l'intensité reste inférieure à $|\Omega_{\max} \cdot T| = 40$.

Contrainte aux bords

Pour le calcul du pulse qui a été implémenté expérimentalement, nous avons contraint les bords du champ de contrôle pour que $\Omega_x(0) = \Omega_y(0) = \Omega_x(T) = \Omega_y(T) = 0$. On

rappelle que la trajectoire optimisée est de telle sorte que $\chi(0) = \chi(T) = 0$, $\theta(0) = 0$ et $\theta(T) = \pi$. L'équation (6.8) montre que, dans ce cas, le seul terme non-nul aux instants $t = 0$ et $t = T$ est $\Omega_y = \dot{\theta}\cos\chi$. Le champ Ω_x est systématiquement nul aux bords. Pour forcer Ω_y à être nul sur les bords, il faut déterminer une condition sur les coefficients θ_n de sorte que $\dot{\theta}(0) = \dot{\theta}(T) = 0$. Comme on a $\dot{\theta}(0) = \dot{\theta}(T) = \pi/T + 2\pi/T \sum n\theta_n$, on peut forcer un des coefficients θ_n à satisfaire l'équation:

$$\theta_k = -\frac{1}{2k}\left(1 + 2\sum_{\substack{n=1 \\ n\setminus\{k\}}}^{M} n\theta_n\right), \tag{6.68}$$

ce qui nous assure d'avoir un champ de contrôle nul aux bords.

6.7 Conclusion

Nous avons mis en œuvre une procédure qui permet de manipuler le profil de robustesse d'une porte NOT tout en gardant des solutions analytiques dépendantes d'un petit nombre de paramètres. L'aspect analytique de la procédure permet de calculer une paramétrisation particulière des solutions et de s'en servir pour augmenter la robustesse du transfert autour du point $(\alpha, \delta) = (0, 0)$, en annulant les dérivées du profil de fidélité en ce point. L'aspect numérique permet d'aller plus loin, dans le sens où le profil de robustesse peut être modifié en définissant une fidélité à maximiser numériquement, qui peut être une fidélité moyenne (Eq. (6.42)), gaussienne (Eq. 6.43), et plus généralement pondérée par une fonction purement arbitraire. Les solutions calculées analytiquement peuvent servir de conditions initiales pour l'algorithme, ce qui fait de la méthode un moyen systématique pour améliorer la qualité des champs de contrôle. Nous pourrions tester toute sorte de paramétrisations, ainsi que d'autres transformations qu'une porte NOT, afin de déterminer dans quelle base les contrôles peuvent être décomposés pour avoir une bonne fidélité avec un nombre restreint de coefficients. Ces différentes études permettraient de connaître les extensions possibles et la généralité de cette approche. Ce problème général reste ouvert dans la littérature.

Chapitre 7

Conclusion et perspectives

7.1 Résumé des différents résultats

Cette section est un résumé des principaux résultats de ce mémoire de thèse. Dans le premier chapitre, nous avons présenté rapidement les domaines de la Résonance Magnétique Nucléaire et de l'Information Quantique. Nous avons expliqué en quoi il est nécessaire de trouver des processus de contrôle efficaces dans ces domaines et pourquoi la théorie du contrôle optimal est adaptée à cette recherche. Il existe deux approches pour déterminer les champs de contrôle optimaux, une approche géométrique et une approche numérique. L'approche géométrique est une méthode qui consiste à appliquer le principe du maximum de Pontryagin afin de calculer les lois de contrôle optimal sur un modèle donné, en utilisant des outils analytiques et géométriques. Néanmoins, cette approche n'est efficace que pour des modèles relativement simples. Nous avons énoncé le principe du maximum de Pontryagin dans le deuxième chapitre, où nous avons donné quelques exemples qui permettent de bien comprendre son application. Nous avons introduit dans ce même chapitre des méthodes numériques de contrôle optimal. Les méthodes numériques permettent de prendre en compte des systèmes beaucoup plus réalistes de grande dimension. Nous avons détaillé l'algorithme GRAPE, qui est un algorithme du gradient dont nous nous sommes servi pour établir certains de nos résultats. Dans ce manuscrit, nous étudions la dynamique d'un système quantique à deux niveaux, qui peut être décrite par les équations de Bloch sans relaxation ou par l'équation de Schrödinger de façon équivalente. L'opérateur d'évolution qui décrit la dynamique des équations de Bloch appartient au groupe $SO(3)$. Pour cette raison, il est très souvent question des angles d'Euler, qui sont des coordonnées particulières permettant de traiter ce type de problème.

Dans le chapitre 3, nous appliquons le principe du maximum de Pontryagin sur une chaîne de trois spins couplés selon le modèle d'Ising quantique dans le cas où les couplages inter-spins sont inégaux. Initialement, la matrice densité de ce système est composée de 63 coordonnées indépendantes. Nous avons montré que ce système peut être réduit à un système dont la dynamique appartient au groupe des rotations $SO(3)$, donc paramétrable par les angles d'Euler. Nous avons appliqué le PMP sur ce système et nous avons ob-

tenu que le Hamiltonien se restreint à celui d'une toupie asymétrique en rotation libre. Ce système étant intégrable et les solutions étant connues, nous avons pu expliciter les champs de contrôle avec des fonctions elliptiques de Jacobi. Nous avons pu calculer le temps théorique minimum nécessaire à un certain transfert en fonction des constantes de couplage inter-spins. A la fin de ce chapitre, nous proposons de généraliser la méthode pour une chaîne de quatre spins. Le traitement de ce type de problème reste un problème ouvert, notamment pour déterminer des conditions où le Hamiltonien de Pontryagin serait intégrable.

Le chapitre 4 est un peu particulier. Il concerne un effet relativement célèbre qui concerne la dynamique d'une toupie asymétrique en rotation libre. Cet effet est appelé *effet de la raquette de tennis*. Il est lié au fait que le portrait de phase des équations d'Euler possède des points d'équilibre instable. Ces points sont associés à des rotations autour d'un certain axe de la raquette, ce qui signifie que ces rotations sont instables. Cette instabilité est à l'origine d'un mouvement très particulier qui est l'effet de la raquette de tennis. Ce travail était motivé par le fait que la littérature sur ce sujet est très pauvre. Les seuls résultats que nous avons pu trouver sont publiés dans un article paru en 1991 [112], puis repris dans un livre sur les systèmes classiques intégrables [113]. Les explications étant incomplètes, nous avons repris l'étude depuis le début. En choisissant judicieusement les angles d'Euler pour décrire la dynamique du problème, nous avons pu expliquer qualitativement cet effet et remarquer l'importance de la séparatrice, qui relie un point d'équilibre instable à un autre. Nous avons montré que cet effet est lié aux propriétés d'une raquette de tennis, mais que, d'une manière plus générale, il a lieu pour n'importe quel corps rigide suffisamment asymétrique. Un choix de coordonnées adéquat et une compréhension qualitative de la dynamique nous a permis de calculer une formule asymptotique qui permet de décrire la robustesse du phénomène et de vérifier si l'effet de la raquette de tennis est bien observé selon la géométrie du solide et les conditions initiales du système.

Ce travail a motivé l'étude suivante d'un système quantique à deux niveaux. Les équations de Bloch sans relaxation et les équations d'Euler sont analogues, excepté que, dans ces dernières, les champs de contrôle correspondent aux vitesses angulaires du solide, qui s'expriment en fonction des paramètres du problème. Ceci implique que la dynamique de la toupie est complètement déterminée par les conditions initiales et les propriétés du solide. Les deux systèmes peuvent être identifiés en supposant que les champs de contrôle des équations de Bloch sont égaux aux vitesses angulaires d'une toupie asymétrique. Ainsi, les trajectoires sur la sphère de Bloch sont les mêmes que celles d'une toupie. La dynamique d'une toupie dépend de ses moments d'inertie principaux. Dans les équations de Bloch, les moments d'inerties sont arbitraires et constituent donc un paramètre sur lequel on peut jouer pour contrôler la forme de la toupie fictive. Une trajectoire classique dépend aussi des conditions initiales du système. Par conséquent, les champs de contrôle des équations de Bloch sont paramétrés par les moments d'inertie et les conditions initiales

de la trajectoire classique, qui constituent deux paramètres au total. En ajustant ces deux paramètres, il est possible de faire un choix sur les propriétés des champs de contrôle. Ce choix permet de sélectionner des champs allant de simples impulsions constantes à des impulsions hyperboliques, en passant par des impulsions circulaires et elliptiques. La transition entre toutes ces familles est continue. Nous avons montré que dans le cas quantique l'effet de la raquette de tennis est associé une porte quantique (porte NOT) et que les champs associés ont certaines propriétés de robustesse concernant l'inversion d'un état. Nous avons calculé les paramètres correspondants à l'effet de la raquette, puis nous les avons appliqué expérimentalement en Résonance Magnétique Nucléaire. Les équations d'Euler possèdent une autre propriété géométrique, appelée *phase de Montgomery*. Cet aspect se traduit par une phase quantique, du même type que la phase de Berry. Nous nous sommes servi de cette propriété pour réaliser des portes phase purement géométriques, très importantes en information quantique. Pour ce faire, nous avons introduit une méthode particulière, propre à notre système, qui utilise les points d'équilibre instable du portrait de phase des équations d'Euler. Nous verrons dans l'annexe B qu'il est possible de considérer un système intégrable plus général et plus riche qui inclut les résultats que nous venons d'évoquer.

Le chapitre 6 concerne l'application du contrôle optimal numérique pour améliorer la robustesse d'une porte NOT par rapport aux inhomogénéités des champs de contrôle. Le but de ce chapitre est de calculer des champs de contrôle analytiques dépendant d'un petit nombre de paramètres. La base de fonctions analytiques est choisie selon une méthode dite de "raccourci adiabatique". Cette méthode permet de paramétrer les champs de contrôle par un ensemble de coefficients, calculés de façon à ce que la porte soit robuste. Dans un premier temps, la robustesse est améliorée analytiquement, puis les coefficients sont optimisés numériquement. Les résultats montrent qu'à partir d'un certain nombre de coefficients, il est inutile d'en considérer davantage. Ce nombre est relativement petit (de l'ordre de 8), ce qui suggère que la paramétrisation est bien choisie. Un champ dépendant de huit coefficients a été implémenté expérimentalement pour montrer l'efficacité et la facilité d'utilisation des champs calculés. Nous avons comparé l'efficacité de cette approche avec une autre méthode standard, dite des *pulses composites*, qui, au contraire, ne permet pas de contrôler la forme du pulse. La méthode des pulses composites est particulièrement simple et permet d'aller très loin dans les calculs analytiques, comme nous le verrons dans l'annexe B.

7.2 Perspectives

Nous avons mis au point plusieurs méthodes pour traiter des problèmes de base en contrôle quantique. Toutes ces méthodes visent à améliorer les stratégies de contrôle existantes et à expliquer les mécanismes de façon géométrique, afin d'améliorer la compréhension générale de ce type de système. Nous avons vu que les stratégies de contrôle déterminées dans cette thèse sont particulièrement simples à mettre en œuvre expérimentalement. Les systèmes étudiés étant très utilisés dans divers domaines comme la résonance magnétique nucléaire, l'information quantique, la cryptographie quantique ou l'imagerie médicale, ces méthodes peuvent être directement utilisées sur des dispositifs expérimentaux ou industriels. Par exemple, nous avons vu dans le chapitre 6 une technique qui permet de décomposer les champs de contrôle dans une certaine base de fonctions analytiques. Ces fonctions sont particulièrement simples à implémenter expérimentalement et cette base a des propriétés de robustesse qui peuvent être utiles en imagerie médicale (IRM) afin d'améliorer la qualité des images. Des méthodes numériques au deuxième ordre [83, 85, 86] pourraient être développées pour obtenir des pulses à la fois robustes et qui transfèrent le système vers un état cible avec une erreur infime, afin de satisfaire les contraintes expérimentales requises en information quantique. Une autre question serait d'étudier la contrôlabilité de ces systèmes en fonction du nombre de coefficients considéré afin de déterminer si telle ou telle base de fonctions est plus appropriée pour un problème donné. Un point intéressant serait d'adopter la même démarche analytico-numérique pour traiter le problème du contraste en IRM [57, 58]. Il s'agirait de trouver une base de fonctions qui permet d'améliorer le signal d'une certaine espèce chimique de manière robuste tout en minimisant le signal des autres espèces. Le contraste des images obtenues serait alors amélioré.

Le contrôle de chaînes de spin est lui aussi un problème qu'il serait intéressant et utile de généraliser. Bien qu'en informatique quantique les portes à un et deux qubits soient suffisantes pour générer un ensemble universel de portes [67], il est nécessaire d'utiliser successivement toutes ces portes afin de manipuler l'ensemble des qubits du système. Cela ne nous assure donc pas que le système soit contrôlé en un temps suffisamment court pour éviter l'effet de l'environnement, ce qui est indispensable en information quantique [38, 65]. Il serait donc très utile de pouvoir déterminer le temps minimum nécessaire pour effectuer des opérations sur un ensemble de qubits ainsi que les contrôles associés, et la théorie du contrôle optimal est le meilleur moyen d'y parvenir [148]. Il serait aussi intéressant de savoir si ces méthodes peuvent être appliquées non pas à une chaîne de spins mais à un réseau en deux dimensions dans lequel les spins sont couplés entre premiers voisins.

Plus généralement, le contrôle optimal permet de déterminer les limites physiques d'un système donné. Sur le long terme, le contrôle optimal pourra réduire considérablement le coût des appareils technologiques qui utilisent le spin nucléaire ou électronique des atomes. Cette théorie doit être couplée aux avancées technologiques, notamment en information quantique, afin de pouvoir exploiter au mieux les possibilités des appareils et de pouvoir

satisfaire les différentes contraintes expérimentales sur les lois de commande ou sur le temps de contrôle. Elle permet aussi de traiter des problèmes extrêmement complexes. Une collaboration franco-allemande appelé EXPLOSYS est vouée à de tels problèmes. Elle réunit différents laboratoires de l'Université de Lyon, de Munich et de Dijon dans le but d'utiliser le contrôle optimal sur des problèmes de base en imagerie médicale. J'ai pu travailler avec ce consortium au cours de ma thèse en restant deux mois à Munich d'octobre à novembre 2015 dans le groupe de S. J. Glaser.

D'autres problèmes ouverts partiellement résolus sont décrits dans l'appendice B.

Annexe

Annexe A

Fonctions elliptiques de Jacobi et intégrales elliptiques

A.1 Fonctions elliptiques de Jacobi

A.1.1 Construction

Les fonctions elliptiques de Jacobi [95] sont une généralisation des fonctions trigonométriques habituelles. Elles permettent de faire le pont entre les fonctions cos et sin et les fonctions hyperboliques cosh et sinh. Ce sont des fonctions de deux arguments qui s'écrivent $\mathrm{sn}(u,m)$, $\mathrm{cn}(u,m)$ et $\mathrm{dn}(u,m)$. La variable u est en général le temps et m est un paramètre qui vérifie:

$$m \in [0,1]. \tag{A.1}$$

Une bonne manière de les construire est d'introduire une fonction appelé *amplitude de Jacobi* reliée à u par:

$$u = \int_0^{\mathrm{am}(u,m)} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - m\sin^2\phi}} = \mathrm{F}(\mathrm{am}(u,m),m). \tag{A.2}$$

Cette intégrale est dite *intégrale elliptique incomplète de première espèce*, nous en discuterons dans la prochaine section. Lorsque $\mathrm{am}(u,m) = \pi/2$, l'intégrale est dite *complète* et se note $\mathrm{K}(m)$. Lorsque $m = 0$, on a simplement $\mathrm{am}(u,0) = u$ et donc $\mathrm{K}(0) = \pi/2$. Pour simplifier les notations, on posera dans toute la suite de ce chapitre

$$\mathrm{am} \equiv \mathrm{am}(u,m), \quad \mathrm{sn} \equiv \mathrm{sn}(u,m), \quad \mathrm{cn} \equiv \mathrm{cn}(u,m), \quad \mathrm{dn} \equiv \mathrm{dn}(u,m). \tag{A.3}$$

La figure A.1 montre am en fonction de u pour plusieurs valeur de m. Les fonctions de Jacobi s'expriment en fonction de am comme:

$$\mathrm{sn} = \sin(\mathrm{am}), \quad \mathrm{cn} = \cos(\mathrm{am}), \quad \mathrm{dn} = \sqrt{1 - m\sin^2(\mathrm{am})}. \tag{A.4}$$

Cette définition permet d'interpréter am comme un angle dont l'évolution temporelle est montrée sur la figure A.1.

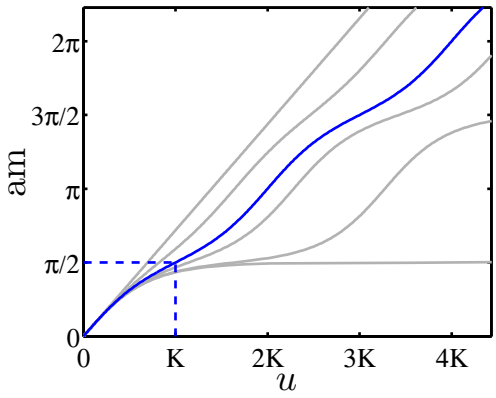

FIGURE A.1 – Fonction $\mathrm{am} = \mathrm{am}(u, m)$ pour $m = 0.8$ (en bleu foncé), puis pour d'autres valeurs de m allant de 0 à 2 (gris clair). $m = 0$ correspond à la courbe la plus à gauche, dans ce cas $\mathrm{am} = u$ et $\mathrm{K}(0) = \pi/2$. Le cas $m = 1$ correspond à la courbe la plus à droite, dont la limite est $\lim_{u\to+\infty} = \pi/2$, et pour laquelle $\mathrm{K}(m) \to +\infty$.

Remarquons que cette définition implique la relation $\mathrm{sn}^2 + \mathrm{cn}^2 = 1$. Toutes ces fonctions peuvent être utilisées pour paramétrer une ellipse de demi grand axe 1 et de demi petit axe $\sqrt{1-m}$, c'est-à-dire une ellipse qui vérifie:

$$x^2 + \frac{y^2}{1-m} = 1. \tag{A.5}$$

En effet, il est trivial de montrer que cette équation est vérifiée pour $x = \mathrm{cn}$ et $y = \sqrt{1-m}\ \mathrm{sn}$. Le rayon de cette ellipse est alors donnée par $r = \sqrt{x^2+y^2} = \mathrm{dn}$. L'angle am, quant à lui, correspond à *l'anomalie excentrique* de l'ellipse. Tout ceci est illustré sur la figure A.2. Comme la fonction $\mathrm{am}(u, m)$ prend la valeur $\pi/2$ lorsque $u = \mathrm{K}(m)$, on

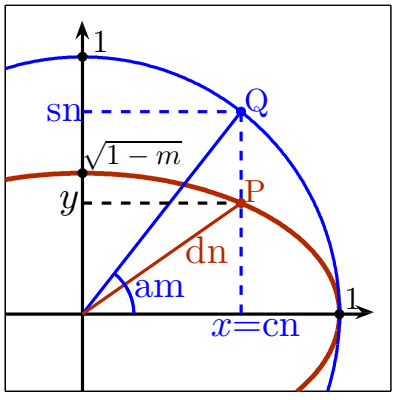

FIGURE A.2 – Paramétrisation d'une ellipse de demi grand axe 1 et de demi petit axe $\sqrt{1-m}$ avec les fonctions de Jacobi. Le point Q est la projection verticale du point P sur le cercle de rayon 1. am est l'anomalie excentrique de l'ellipse, dn est le rayon, $\mathrm{cn} = x$ et $\mathrm{sn} = y/\sqrt{1-m}$.

déduit de (A.4) que les fonction sn et cn sont de période $4\,\mathrm{K}(m)$ et que dn est de période

$2\,\mathrm{K}(m)$.

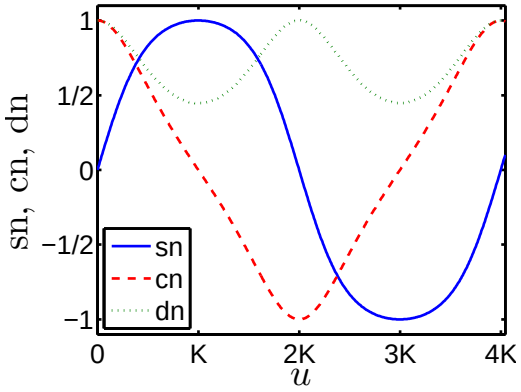

FIGURE A.3 – Fonctions elliptique de Jacobi $\mathrm{sn}(u,m)$ (en bleu), $\mathrm{cn}(u,m)$ (en pointillés rouges) et $\mathrm{dn}(u,m)$ (en poitillés verts fins) pour $m = 0.8$. Les fonctions sn et cn sont de période $4\,\mathrm{K}(m)$, dn est de période $2\,\mathrm{K}(m)$.

A.1.2 Propriétés

Somme des carrés. Les relations (A.4) impliquent les relations suivantes:

$$\mathrm{sn}^2 + \mathrm{cn}^2 = 1, \quad m\,\mathrm{sn}^2 + \mathrm{dn}^2 = 1, \quad \mathrm{dn}^2 - m\,\mathrm{cn}^2 = 1 - m. \tag{A.6}$$

Valeurs remarquables. Le tableau ci-dessous donne les valeurs des fonctions elliptiques et de l'amplitude de Jacobi lorsque u est un multiple entier de $\mathrm{K}(m)$.

$f(u,m)\backslash u$	$-2\,\mathrm{K}(m)$	$-\mathrm{K}(m)$	0	$\mathrm{K}(m)$	$2\,\mathrm{K}(m)$
am	$-\pi$	$-\frac{\pi}{2}$	0	$\frac{\pi}{2}$	π
sn	0	-1	0	1	0
cn	-1	0	1	0	-1
dn	1	$\sqrt{1-m}$	1	$\sqrt{1-m}$	1

Dérivées. Les dérivées de chacune des fonctions par rapport à la variable u sont données par:

$$\frac{d\,\mathrm{am}}{du} = \mathrm{dn}, \quad \frac{d\,\mathrm{sn}}{du} = \mathrm{cn}\,\mathrm{dn}, \quad \frac{d\,\mathrm{cn}}{du} = -\,\mathrm{sn}\,\mathrm{dn}, \quad \frac{d\,\mathrm{dn}}{du} = -m\,\mathrm{sn}\,\mathrm{cn}\,. \tag{A.7}$$

Primitives. Leurs primitives vérifient:

$$\int \mathrm{sn}\,du = \sqrt{m}\,\ln(\mathrm{dn} - \sqrt{m}\,\mathrm{cn}), \quad \int \mathrm{cn} = \sqrt{m}\,\arccos(\mathrm{dn}), \quad \int \mathrm{dn}\,du = \mathrm{am}\,. \tag{A.8}$$

Familles de fonctions lorsque $m = 0$ ou 1. Lorsque m atteint la valeur limite 0 ou 1, les fonctions de Jacobi deviennent des fonctions trigonométriques standards. Les fonctions sont données dans le tableau suivant:

	$m = 0$	$m = 1$
$\mathrm{am}(u, m)$	u	$2\arctan(e^u) - \frac{\pi}{2}$
$\mathrm{sn}(u, m)$	$\sin u$	$\tanh(u)$
$\mathrm{cn}(u, m)$	$\cos u$	$\mathrm{sech}(u)$
$\mathrm{dn}(u, m)$	1	$\mathrm{sech}(u)$

A.2 Intégrales elliptiques

Les intégrales elliptiques généralisent les fonctions trigonométriques inverses. Il existe trois formes d'intégrales elliptiques appelées *intégrale elliptique de première, deuxième* et *troisième espèce.* On dit que ces intégrales sont *complètes* lorsqu'elles sont évaluées sur un intervalle particulier que nous allons expliciter, et *incomplètes* sinon. Les intégrales elliptiques de première et deuxième espèce ne dépendent que du paramètre m qui correspond à l'excentricité de l'ellipse de la figure A.2, alors que les intégrales de troisième espèce dépendent d'un paramètre supplémentaire.

A.2.1 Intégrale elliptique de première espèce

Définition L'intégrale elliptique incomplète de première espèce est notée $F(\varphi, m)$. Elle s'exprime sous la forme:

$$F(\varphi, m) = \int_0^{\varphi} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - m\sin^2\theta}} d\theta. \tag{A.9}$$

On remarque que $\sqrt{1 - m\sin^2\theta}$ est le rayon de l'ellipse au point $\mathrm{am} = \theta$. Cette intégrale peut donc s'écrire sous la forme $\int d\theta/r$ où r est le rayon de l'ellipse. On appelle $\mathrm{K}(m)$ l'intégrale elliptique complète de première espèce. Elle est définie par:

$$\mathrm{K}(m) = \mathrm{F}\left(\frac{\pi}{2}, m\right). \tag{A.10}$$

Elle ne dépend donc que du paramètre m. La figure A.4 représente l'évolution de F en fonction de φ ainsi que celle de K en fonction de m.

Valeurs limites. La fonction $\mathrm{K}(m)$ admet les valeurs limites suivantes:

$$\mathrm{K}(0) = \frac{\pi}{2}, \quad \lim_{m\to 1} \mathrm{K}(m) = +\infty. \tag{A.11}$$

Développement limité. Si m est proche de 1, la fonction $\mathrm{K}(m)$ avec $m = 1 - \epsilon$ s'exprime sous la forme:

$$\mathrm{K}(1 - \epsilon) = -\frac{1}{2}\ln(\epsilon) + \ln(4) + o(\epsilon). \tag{A.12}$$

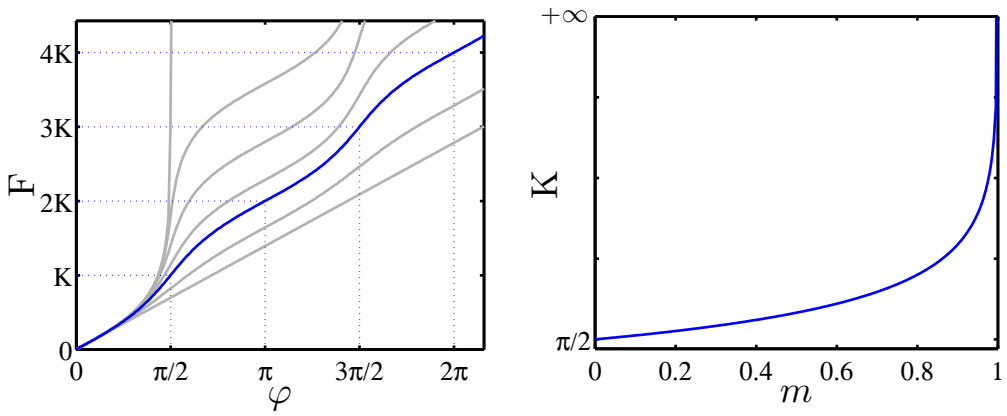

FIGURE A.4 – *A gauche:* Fonction $\mathrm{F}(\varphi, m)$ en fonction de φ pour $m = 0.8$ (en bleu). Le K sur l'axe des ordonnées représente $\mathrm{K}(0.8)$. Les courbes en gris clair sont les fonctions $\mathrm{F}(\varphi, m)$ pour d'autres valeurs allant de $m = 0$ (courbe la plus à droite), à $m = 1$ (courbe la plus à gauche). On rappelle que $\mathrm{F}(\varphi, m)$ est l'inverse de l'amplitude $\mathrm{am}(\varphi, m)$ représentée sur la figure A.1. *A droite:* Evolution de $\mathrm{K}(m)$ en fonction de m. On rappelle que $\mathrm{K}(m) = \mathrm{F}(\pi/2, m)$.

A.2.2 Intégrale elliptique de deuxième espèce

Définition. Cette intégrale donne la longueur d'un arc d'une ellipse. Elle est notée $\mathrm{E}(\varphi, m)$ et elle est définie par:

$$\mathrm{E}(\varphi, m) = \int_0^{\varphi} \sqrt{1 - m \sin^2 \theta} d\theta. \tag{A.13}$$

Le rayon de l'ellipse de la figure A.2 étant donné par $r = 1 - m \sin^2 \theta$, on remarque que E peut s'exprimer sous la forme $\int r d\theta$ ce qui correspond à la longueur d'un arc de l'ellipse. Cette intégrale est dite complète si $\varphi = \pi/2$. On a plus formellement:

$$\mathrm{E}(m) = \mathrm{E}\left(\frac{\pi}{2}, m\right). \tag{A.14}$$

L'intégrale complète donne le quart du périmètre de l'ellipse.

Valeurs limites. Les valeurs aux bords sont données par:

$$\mathrm{E}(0) = \frac{\pi}{2}, \quad \mathrm{E}(1) = 1. \tag{A.15}$$

Développement limité Lorsque $m = 1 - \epsilon$ avec $\epsilon \to 0$, l'intégrale elliptique complète de deuxième espèce devient:

$$\mathrm{E}(1 - \epsilon) = 1 - \frac{\epsilon \ln(\epsilon)}{4} - \epsilon\left(\frac{1}{4} - \ln(2)\right) + o(\epsilon). \tag{A.16}$$

A.2.3 Intégrale elliptique de troisième espèce

Définition. L'intégrale elliptique de troisième espèce est plus compliquée que les deux autres dans le sens où elle dépend de deux paramètres, l'ellipticité m et un autre paramètre

noté μ. Elle s'écrit sous la forme:

$$\Pi(\varphi, \mu, m) = \int_0^{\varphi} \frac{d\theta}{(1 - \mu \sin^2 \theta)\sqrt{1 - m \sin^2 \theta}}. \tag{A.17}$$

Le paramètre μ n'est pas borné, on a $\mu \in \mathbb{R}$. La forme complète s'obtient en posant $\varphi = 1/2$, c'est-à-dire:

$$\Pi(\mu, m) = \Pi\left(\frac{\pi}{2}, \mu, m\right). \tag{A.18}$$

Valeurs limites. La fonction $\Pi(\mu, m)$ admet les valeurs limites suivantes:

$$\Pi(\mu, 0) = \frac{\pi}{2}, \quad \lim_{m \to 1} \Pi(\mu, m) = +\infty. \tag{A.19}$$

On a de plus $\Pi(\varphi, 0, m) = \mathrm{F}(\varphi, m)$.

Annexe B

Problèmes ouverts

Cette section décrit des projets de recherche sur lesquels nous travaillons actuellement. Nous présentons les calculs préliminaires réalisés puis nous résumons les questions ouvertes qu'il reste à élucider. Le premier problème concerne une méthode analytique optimale pour améliorer la robustesse des pulses vis-à-vis des inhomogénéités des champs. Le deuxième est un modèle qui généralise celui considéré dans le chapitre 5 sur le spin quantique et la toupie d'Euler. Il s'agit du modèle d'une toupie asymétrique avec un terme de dérive.

B.1 Méthode analytique optimale pour les pulses composites

B.1.1 Modèle

Des travaux récents ont été réalisés dans le but de trouver une méthode analytique qui permet d'améliorer la robustesse des pulses composites [149]. Cet article donne une méthode très générale pour améliorer la robustesse de n'importe quel transfert par rapport aux inhomogénéités du champs de contrôle $\vec{B}_1$. En notant α le facteur d'échelle sur l'amplitude des contrôles, le coût final $J(\alpha)$ pour un transfert quelconque s'écrit comme un polynôme en α dont les coefficients dépendent des phases du pulse composite. L'optimisation du coût $J(\alpha)$ se restreint alors au calcul des coefficients d'un polynôme. Une fois les coefficients a_n du polynôme calculés, les différentes phases $\{\phi_1, \cdots, \phi_N\}$ du pulse composite sont déterminées à travers des relations du type $a_n = f(\phi_1, \cdots \phi_n)$.

Notre but est de généraliser cette méthode pour améliorer la robustesse des contrôles par rapport aux inhomogénéités des champs $\vec{B}_0$ et $\vec{B}_1$. On rappelle qu'un pulse composite est une succession de pulses de même durée, de même intensité et d'aire π, mais de phases différentes. On choisit un pulse composite de durée totale NT où N est le nombre de phases et T la durée de chaque pulse. Le pulse entre les instants nT et $(n+1)T$ est donné par la formule:

$$u_x = \frac{\pi}{T}\cos(\phi_n), \quad u_y = \frac{\pi}{T}\sin(\phi_n). \tag{B.1}$$

En présence des inhomogénéités de champs, le Hamiltonien H_n qui gouverne l'équation de Schrödinger entre les instants nT et $(n+1)T$ est une fonction continue de α et δ donnée par:

$$H_n = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} \delta & (1+\alpha)\frac{\pi}{T}e^{-i\phi_n} \\ (1+\alpha)\frac{\pi}{T}e^{i\phi_n} & -\delta \end{pmatrix}. \tag{B.2}$$

Nous avons vu dans la section 2.5 du chapitre 2 que pour un tel Hamiltonien, le propagateur peut s'exprimer analytiquement. On introduit les variables suivantes:

$$x = \frac{(1+\alpha)\pi}{\Omega T}\sin\left(\frac{\Omega T}{2}\right), \quad y = \frac{\delta}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega T}{2}\right), \quad z = \cos\left(\frac{\Omega T}{2}\right), \tag{B.3}$$

avec $\Omega = \sqrt{\delta^2 + \frac{(1+\alpha)^2\pi^2}{T^2}}$. On remarque que ces variables vérifient $x^2+y^2+z^2=1$. On peut montrer que le propagateur U_n entre les instants nT et $(n+1)T$ s'écrit alors sous la forme:

$$U_n = \begin{pmatrix} z+iy & ixe^{-i\phi_n} \\ ixe^{i\phi_n} & z-iy \end{pmatrix}. \tag{B.4}$$

Le propagateur total à l'instant final est donc donné par:

$$U(t_f) = U_N U_{n-1}\cdots U_1. \tag{B.5}$$

Nous allons voir que les composantes de $U(t_f)$ sont des polynômes en x, y et z. Ces variables étant reliées aux paramètres α et δ, on peut améliorer la robustesse d'un transfert par rapport aux inhomogénéités des champs en l'améliorant par rapport à x, y et z. Nous allons étudier le cas particulier d'une porte NOT.

B.1.2 Cas d'une porte NOT

Pour illustrer la démarche proposée, on souhaite réaliser une porte NOT de la forme:

$$U_c = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{B.6}$$

Dans ce cas, le nombre de pulses N doit être choisi impair, afin d'assurer l'inversion du vecteur de Bloch lorsque $(\alpha,\delta)=(0,0)$. La fidélité associée à ce transfert s'écrit:

$$P(x,y,z) = \Re(U_{1,2}(t_f)) \tag{B.7}$$

En développant la formule (B.5), on peut montrer que la fidélité est donnée par un polynôme qui ne contient que des termes d'ordre N. Ce polynôme est de la forme:

$$P(x,y,z) = a_{0,0}x^N + f_1(y,z)x^{N-2} + \cdots + f_n(y,z)x^{N-2n} + \cdots + f_{\frac{N-1}{2}}(y,z)x, \tag{B.8}$$

où les fonctions f_n sont données par:

$$f_n(y,z) = \sum_{k=0}^{2n} a_{k,2n-k}y^k z^{2n-k}. \tag{B.9}$$

Le polynôme P donne directement le profil de robustesse en fonction des variables x, y et z. Dans l'idéal, si $P = 1$ pour toutes les valeurs du triplet (x, y, z), cela signifie que le transfert est infiniment robuste, i.e. qu'il est réalisé quelques soient les valeurs de x, y et z. Les coefficients du polynôme sont des fonctions des phases du pulse composite. En d'autres termes, on a $a_{n,m} = a_{n,m}(\phi_1, \cdots, \phi_N)$. Il est a priori possible de déterminer des coefficients $a_{n,m}$ afin d'avoir un profil $P(x, y, z)$ intéressant, et d'en déduire les phases ϕ_n correspondantes.

Nous allons expliciter les relations entre les phases du pulse et les coefficients du polynôme pour certains cas particulier. Remarquons qu'ici, le nombre de coefficients du polynôme est de $N_{\text{coef}} = 1 + 3 + 5 + \cdots + N$, soit au total:

$$N_{\text{coef}} = \frac{(N+1)^2}{4}. \tag{B.10}$$

Or, nous ne disposons que de N phases ϕ_n pour contrôler les coefficients du polynôme. Par conséquent, il existe des contraintes implicites sur les coefficients $a_{n,m}$, qu'il serait intéressant de déterminer. Nous n'allons pas le faire ici. Nous allons optimiser la robustesse selon une méthode particulière qui permet de réduire le nombre de coefficients du polynôme.

B.1.3 Optimisation d'un profil de robustesse en forme de croix

Revenons au problème initial où les inhomogénéités sont représentées par les variables α et δ, liées aux variables x, y et z via l'équation (B.3). Le problème consiste à optimiser les phases ϕ_n de telle sorte que la fidélité $P(\alpha, \delta) = \Re(U_{1,2}(t_f))$ soit le plus proche de 1 pour tout point (α, δ). Nous avons vu que cela consiste à optimiser les coefficients du polynôme (B.8), avec des contraintes implicites sur les coefficients. Mais on peut aussi améliorer la fidélité $P(\alpha, \delta)$ sur les courbes $\alpha(\delta)$ qui vérifient:

$$y^k z^{2n-k} = 0. \tag{B.11}$$

De cette manière, le polynôme se simplifie sous la forme:

$$P(x, y, z) = a_{0,0}x^N + [a_{0,2}z^2 + a_{2,0}y^2]x^{N-2} + \cdots + [a_{0,N-1}z^{N-1} + a_{N-1,0}y^{N-1}]x. \tag{B.12}$$

Le nombre de coefficients du polynôme est alors donné par $N_c = N$. Il y a donc autant de coefficients que de phases. La condition (B.11) implique que l'optimisation est faite selon des directions de l'espace (α, δ) qui sont données soit par la droite $\delta = 0$, ou par la condition $\Omega T = \pi$. Ce modèle consiste donc à optimiser le profil de robustesse sur les courbes suivantes:

$$\delta = 0, \quad \alpha = \sqrt{1 - \frac{\delta^2 T^2}{\pi^2}} - 1. \tag{B.13}$$

Ces deux courbes sont illustrées sur la figure B.1. On pourra remarquer que la structure du profil de robustesse des pulses composites présentés dans le chapitre 6 a la même allure que la courbe bleue de cette figure.

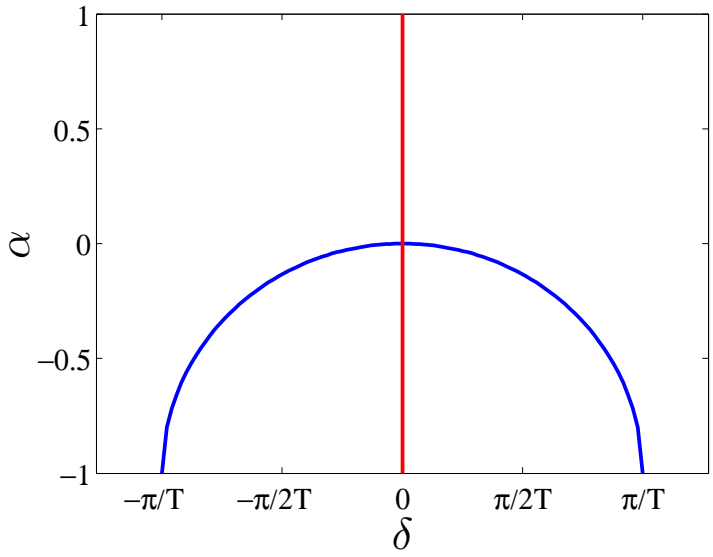

FIGURE B.1 – Courbes satisfaisant la condition $xy = 0$ dans le plan (α, δ). La courbe bleue vérifie $\alpha = \sqrt{1 - \frac{\delta^2 T^2}{\pi^2}} - 1$. La courbe rouge est la droite d'équation $\delta = 0$. La robustesse est optimisée le long de ces courbes.

B.1.4 Application pour un composite 5π

On cherche à optimiser les phases d'un pulse de telle sorte que $N = 5$. En développant l'équation (B.5), et en choisissant une fidélité du type $P = \Re(U_{1,2}(t_f))$, on peut montrer que les coefficients du polynôme (B.12) vérifient:

$$\begin{cases} a_{0,0} = \sin(\phi_1 - \phi_2 + \phi_3 - \phi_4 + \phi_5) \\ a_{0,2} = -\sum_{\ell=1}^{3} \sum_{m=\ell+1}^{4} \sum_{n=m+1}^{5} \sin(\phi_\ell - \phi_m + \phi_n) \\ a_{2,0} = \sum_{\ell=1}^{3} \sum_{m=\ell+1}^{4} \sum_{n=m+1}^{5} (-1)^{\ell-m+n} \sin(\phi_{ell} - \phi_m + \phi_n) \\ a_{0,3} = \sum_{n=1}^{5} \sin(\phi_n) \\ a_{3,0} = -\sum_{n=1}^{5} (-1)^n \sin(\phi_n). \end{cases} \tag{B.14}$$

On peut montrer que pour assurer que la fidélité P au point $(\alpha, \delta) = (0, 0)$ soit égale à 1, il suffit d'imposer $a_{0,0} = 1$. Le polynôme $P(x, y, z)$ s'écrit alors sous la forme suivante:

$$P(x, y, z) = x^5 + [a_{0,2} z^2 + a_{2,0} y^2] x^3 + [a_{0,3} z^4 + a_{3,0} y^4] x. \tag{B.15}$$

Le but est de trouver les coefficients $a_{n,m}$ pour que le polynôme soit le plus proche possible de 1 pour toute valeur du triplet (x, y, z). Il y a une autre contrainte que nous n'avons pas évoquée qui est la suivante:

$$P(x, y, z) \leq 1. \tag{B.16}$$

Cette contrainte est due au fait que la fidélité étant définie par $P = \Re(U_{1,2}(t_f)$, elle ne peut pas dépasser 1, ce qui implique une contrainte sur le polynôme. Tout le problème

d'optimisation se restreint alors à calculer un polynôme efficace. Ici, nous n'allons pas utilisé de méthodes très abouties pour le calcul de ce polynôme. Il existe des méthodes plus poussées concernant ce type de problème (voir par exemple [150, 151]). Nous nous contentons de chercher numériquement les coefficients $a_{n,m}$ qui minimisent la quantité:

$$\sigma = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \int_{z_{\min}}^{z_{\max}} |1 - P(x,y,z)|^2 \, dxdydz, \tag{B.17}$$

Remarquons qu'ici, le programme cherche des coefficients tels que le polynôme approxime la fonction idéale $P^*(x,y,z) = 1$. Cependant, le polynôme idéal est une fonction purement arbitraire. Un autre exemple serait de choisir un polynôme tel que ses dérivées par rapport à α et δ au point $(\alpha, \delta) = (0,0)$ soient nulles jusqu'à un certain ordre. On s'attendrait alors à retrouver les résultats de Jones [137], qui a optimisé ce type de coût pour une porte NOT. Ici, la méthode est plus générale, et laisse le choix sur le profil de fidélité que l'on souhaite optimiser.

Pour être plus exact, il faut se rappeler que, dans notre cas, on cherche à optimiser le long de deux directions qui sont représentées sur la figure B.1 dans le plan (α, δ). Celles-ci sont associées à des trajectoires de type $y = 0$ et $z = 0$ dans l'espace (x, y, z). En utilisant la relation $x^2 + y^2 + z^2 = 1$, ces deux trajectoires sont associées à des polynômes qui ne dépendent que de x. Ces polynômes sont donnés par:

$$\begin{cases} P_1(x, \sqrt{1-x^2}, 0) = [x^5 - a_{0,2} + a_{0,3}]x^5 + [a_{0,2} - 2a_{0,3}]x^3 + a_{0,3}x \\ P_2(x, 0, \sqrt{1-x^2}) = [x^5 - a_{2,0} + a_{3,0}]x^5 + [a_{2,0} - 2a_{3,0}]x^3 + a_{3,0}x. \end{cases} \tag{B.18}$$

Le polynôme P_1 correspond à l'équation $\alpha = \sqrt{1 - \delta^2 T^2/\pi} - 1$ (courbe bleue de la figure B.1), et P_2 à l'équation $\delta = 0$ (courbe rouge). On remarque que ces deux polynômes sont indépendants, c'est-à-dire qu'ils ne dépendent pas des mêmes coefficients. Le problème peut être résolu en optimisant ces deux polynômes indépendamment.

On cherche pour cela des coefficients qui sont de sorte que P_1 et P_2 minimisent les fonctions suivantes:

$$\sigma_1 = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} |1 - P_1|^2 dx, \quad \sigma_2 = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} |1 - P_2|^2 dx. \tag{B.19}$$

Application. Un exemple de résultat pour les polynômes est le suivant:

$$a_{0,2} = 1.2281, \quad a_{0,2} = 3.0152, \quad a_{2,0} = 2.4126, \quad a_{3,0} = 2.1956. \tag{B.20}$$

Les polynômes P_1 et P_2 sont représentés en fonction de x sur la figure B.2. Les coefficients étant connus, il faut maintenant inverser les relations (B.14) afin d'en déduire les phase ϕ_n correspondantes. On détermine numériquement les valeurs de chaque phase en utilisant un algorithme de T. Dekker [125]. On obtient le résultat suivant:

$$\phi_1 = 2.2978, \quad \phi_2 = 7.1559, \quad \phi_3 = 1.1090, \quad \phi_4 = 3.5270, \quad \phi_5 = 2.0579. \tag{B.21}$$

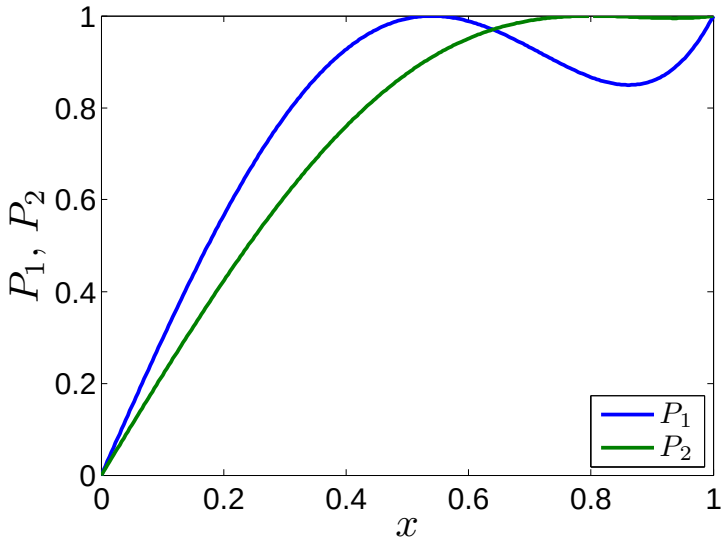

FIGURE B.2 – Polynômes P_1 et P_2 en fonction de x.

Cependant, la solution n'est pas exacte. L'algorithme ne trouve qu'une solution approchée. En particulier, pour de telles valeurs de ϕ_n, l'équation $a_{00} = 1$ du système (B.14) n'est vérifiée qu'à 10^{-1} près. Cela signifie qu'au point $(\alpha, \delta) = (0, 0)$, la fidélité est de l'ordre de 0.9. Cet aspect suggère que les coefficients des polynômes P_1 et P_2 ne sont pas tout-à-fait indépendants. Pour résoudre ce type de problème, il serait intéressant de s'inspirer davantage de l'article [149]. Les auteurs ont décomposé le propagateur $U(t_f)$ dans une base particulière, ce qui leur a permis d'obtenir des relations plus simples entre les phases et les coefficients des polynômes. Il est possible que cette démarche puisse être adaptée dans notre modèle, ce qui permettrait d'avoir une meilleure vision des différentes corrélations et de pouvoir calculer les phases plus simplement.

Le profil de robustesse du pulse composite (B.21) dans le plan (α, δ) est donné sur la figure B.3.

B.1.5 Questions ouvertes

Il semble nécessaire d'exprimer la matrice d'évolution $U(t_f)$ afin de mettre en valeur les différentes contraintes sur les coefficients du polynôme et de pouvoir calculer plus facilement les phases du pulse composite en fonction de ces coefficients. Est-il possible d'adapter la méthode expliquée dans [149] dans notre cas ? Est-il possible d'appliquer la méthode dans le cas plus général où l'on optimise la robustesse sur toute la fenêtre (α, δ) et pas seulement selon une ou deux directions ?

Il est possible de considérer un autre type de pulse composite, qui consiste en une succession de pulses très courts, séparés par une durée pendant laquelle le système n'évolue que sous l'influence de l'offset δ. Cela permet de découpler la dynamique due au offset de celle due aux champs de contrôle. Lorsqu'un pulse très court est appliqué, on peut non seulement négliger l'effet dû à l'offset, mais aussi la relaxation, dont nous n'avons pas tenu

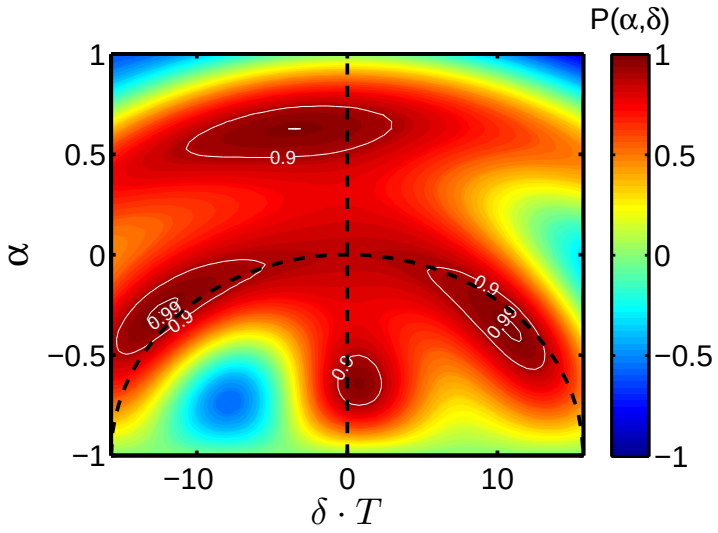

FIGURE B.3 – Fidélité du pulse composite calculée dans le plan (α, δ). Les lignes en pointillés sont les courbes sur lesquelles la robustesse a été optimisée.

compte dans notre modèle. On peut alors construire un modèle qui se compose d'une série de pulses très courts, entre lesquels la dynamique du système est gouvernée par son offset et les paramètres de relaxation. Il serait intéressant de savoir si la robustesse d'un transfert dans la boule de Bloch peut être amélioré selon une méthode similaire. Remarquons que des impulsions de courte durée sont utilisées par l'algorithme de Shinnar-Le Roux [88], mais celui-ci concerne un modèle sans relaxation.

B.2 La toupie d'Euler avec dérive

Dans le chapitre 5, nous avons calculé une famille de champs de contrôle en identifiant les équations du mouvement d'un solide en rotation libre et les équations de Bloch. Dans les conventions habituelles de la RMN, les champs de contrôle sont polarisés dans le plan $(\vec{e}_1, \vec{e}_2)$ de la sphère de Bloch. Nous avons pris ces conventions dans la section 5.4 de ce chapitre. Nous avons vu que les trajectoires et les champs de contrôle dépendent de deux paramètres, le paramètre E, lié aux conditions initiales d'une trajectoire de la toupie d'Euler, et le paramètre k, qui permet de contrôler les moments d'inertie principaux du solide. Nous avons identifié le modèle quantique et le modèle classique en considérant les équations de Bloch à la résonance, sans dérive liée au offset. Cependant, nous allons voir que ce terme peut être pris en compte. Le modèle est celui d'une toupie en rotation avec un offset constant. Il reste intégrable et conduit à des champs paramétrés par des fonctions elliptiques de Jacobi, plus compliqués, et dépendant de trois paramètres qui sont E, k, et l'offset Δ. Cette famille de champs contient d'autant plus de solutions connues. Elle permet de retrouver les trajectoires adiabatiques utilisées pour la phase de Berry [121], les trajectoires non-adiabatiques utilisées pour réaliser des portes phases dans [118], ainsi que tous les résultats présentés dans le chapitre 5, qui correspondent à la limite $\Delta = 0$. Nous allons voir que ce modèle contient une multitude de solutions périodiques ayant des propriétés différentes. Nous n'allons pas entrer trop dans les détails, mais nous donnerons les outils nécessaires pour approfondir l'étude du modèle.

B.2.1 Modèle

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 5, les équations de Bloch de la configuration (b) (habituelle en RMN) peuvent être identifiées à celles d'une toupie fictive particulière, dont les moments d'inerties principaux sont donnés par $I_1 = 1$, $I_2 = 1/k^2$ et $I_3 \to +\infty$. Le modèle de la toupie s'obtient en substituant $\omega_1 = M_1$ et $\omega_2 = k^2 M_2$. En ajoutant un offset, les équations sont celles du moment cinétique d'une toupie avec dérive. Elles vérifient:

$$\dot{\vec{M}} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta & -k^2 M_2 \\ -\Delta & 0 & M_1 \\ k^2 M_2 & -M_1 & 0 \end{pmatrix} \vec{M}. \tag{B.22}$$

On pose $|\vec{M}| = 1$ sans perdre de généralité. On peut vérifier que ce système différentiel admet les deux intégrales premières suivantes:

$$M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 = 1, \quad M_1^2 + k^2 M_2^2 + 2\Delta M_3 = 2E. \tag{B.23}$$

Dans le repère $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$, ces équations correspondent à des surfaces. La première est simplement la sphère de Bloch. La deuxième est un paraboloïde elliptique, d'axe $\vec{e}_3$, dont le sommet est à une distance $H = E/\Delta$ de l'origine, et dont l'intersection avec le plan $(\vec{e}_1, \vec{e}_2)$ forme une ellipse de demi grand axe $a = \sqrt{2E}/k$ et de demi petit axe $b = \sqrt{2E}$. Le

paraboloïde est représenté sur la figure B.4. Les solutions du système (B.22) correspondent

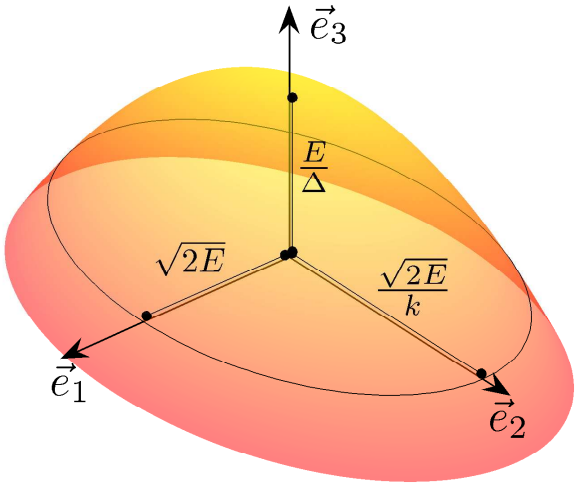

FIGURE B.4 – Surface correspondant à l'équation $M_1^2 + k^2 M_2^2 + 2\Delta M_3 = 2E$.

à l'intersection de ces deux surfaces. Les paramètres Δ et k affectent les propriétés du cylindre, et le paramètre E ne modifie que sa taille globale. A chaque couple (k, Δ) est associé un portrait de phase sur la sphère, et le paramètre E permet de sélectionner une des trajectoires de ce portrait. Le paramètre k modifie l'ellipticité du paraboloïde, et Δ sa hauteur. La figure B.5 montre le portrait de phase associé à différents couples (k, Δ). Sur cette figure, les quatre schémas du haut montrent le portrait de phase correspondant à $\Delta = 0$, que nous avons vu dans le chapitre 5. On voit que lorsque la valeur de Δ augmente, les points d'équilibre instable "remontent" vers le pôle nord de la sphère. Dans certains cas, ils se regroupent exactement sur le pôle nord. On peut montrer qu'il existe deux catégories de séparatrices. Dans la première catégorie, les séparatrices relient deux points d'équilibre instable distincts, alors que les séparatrices de la deuxième catégorie se rejoignent uniquement sur le pôle nord de la sphère. On peut montrer que ces deux types de séparatrices et les points d'équilibre instable associés sont donnés par:

Catégorie	1	2
Équation	$2E = \frac{\Delta^2}{k^2} + k^2$	$E = \Delta$
$\vec{M}_{\text{Instable}}$	$\left(0, \sqrt{1 - \frac{\Delta^2}{k^4}}, \frac{\Delta}{k^2}\right)$	$(0, 0, 1)$

Lorsque $\Delta = 1$, la séparatrice devient un point, qui est sur le pôle nord de la sphère. La séparatrice disparaît complètement lorsque $\Delta > 1$. La dynamique de $\vec{M}$ est alors dominée par l'offset Δ, et consiste globalement en des rotations autour de l'axe $\vec{e}_3$ de la sphère de Bloch. Les schémas du bas de la figure B.5 représentent cette situation.

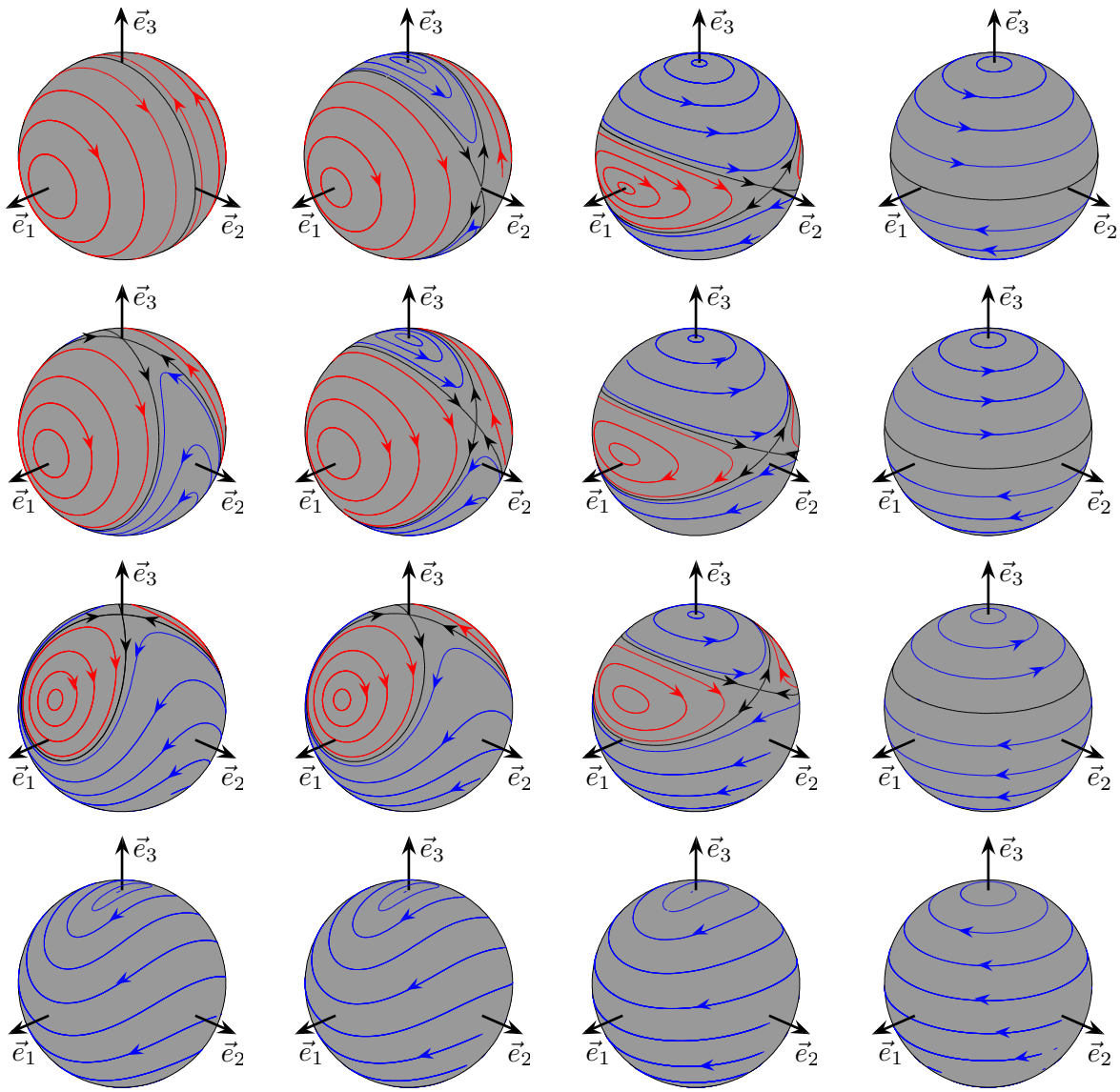

FIGURE B.5 – Portrait de phase du système (B.22) en fonction des paramètres k et Δ. De haut en bas, on a $\Delta \in \{0, 0.1, 0.3, 1\}$, et de gauche à droite, $k \in \{0, 0.5, 0.9, 1\}$. Les trajectoires en noir sont les séparatrices.

B.2.2 Phase géométrique

Les quatre schémas à gauche de la figure B.5 donnent les portraits de phase de l'équation (B.22) pour différentes valeurs de $\Delta \in \{0, 0.1, 0.3, 1\}$ et pour $k = 1$. Dans le cas que nous avons traité dans le chapitre 5, la séparatrice est confondue avec l'équateur de la sphère, comme sur le schéma en haut à droite de la figure B.5. Lorsque Δ n'est pas nul, la séparatrice remonte vers le pôle nord. Elle est donnée par l'équation $M_3 = \Delta$. Chaque point de cette trajectoire est un point d'équilibre. Par conséquent, une trajectoire voisine réalise un cycle en un temps qui tend vers l'infini. Ces trajectoires sont en fait des trajectoires adiabatiques, qui sont utiles pour réaliser des portes phase purement géométriques [121]. Les autres trajectoires sont utilisées dans [118, 120] pour réaliser des portes

phase géométriques non-adiabatiques. Les quatre schémas du haut, qui correspondent au cas traité dans le chapitre 5, nous ont servi à mettre au point des portes phase en utilisant la formule de Montgomery. Ces cas étant ici des cas particuliers, existe-t-il une formule simple plus générale qui comprend la phase de Berry, la phase non adiabatique utilisée dans [120] et la phase de Montgomery ?

Pour le montrer, calculons le système différentiel qui gouverne la dynamique des angles d'Euler, en gardant la même convention que dans le chapitre 5. Dans cette configuration, la phase globale est donnée par l'angle noté ϕ. Les champs de contrôle sont donnés en fonction des angles d'Euler par:

$$\omega_1 = M_1 = \cos\theta, \quad \omega_2 = k^2 M_2 = -\sin\theta\cos\psi, \quad \omega_3 = \Delta. \tag{B.24}$$

En suivant la méthode présentée dans la section 2.6 du chapitre 1, on obtient le système différentiel suivant:

$$\begin{cases} \dot{\theta} = \Delta\cos\psi - k^2\sin\theta\sin\psi\cos\psi \\ \dot{\phi} = \Delta\frac{\sin\psi}{\sin\theta} + k^2\cos^2\psi \\ \dot{\psi} = \cos\theta - \Delta\frac{\sin\psi}{\tan\theta} - k^2\cos\theta\cos^2\psi. \end{cases} \tag{B.25}$$

En se servant de la conservation de l'énergie (Eq. (B.23)), et de la dernière équation du système (B.25), on peut démontrer la relation suivante:

$$\dot{\phi} = 2E - \dot{\psi}\cos\theta - \Delta\sin\theta\sin\psi. \tag{B.26}$$

Or, le terme $\sin\theta\sin\psi$ correspond à la composante M_3 du vecteur de Bloch exprimée en fonction des angles d'Euler. Par conséquent, en remarquant que $\cos\theta = \int_{\pi/2}^{\theta}\sin\theta' d\theta'$, on peut montrer qu'après une période T du moment cinétique, la variation de la phase $\Delta\phi$ est donnée par la formule suivante:

$$\Delta\phi = 2ET - \mathcal{A} - \Delta\int_0^T M_3(t)dt, \tag{B.27}$$

où $\mathcal{A}$ est l'aire balayée par le vecteur $\vec{M}$ pendant un cycle. Cette formule est relativement simple, et permet de retrouver la phase de Berry et d'autres phases utilisées dans [120, 119]. Pour replacer cette formule dans la littérature, on peut se servir de la formule proposée par Aharonov-Anandan [118], dans laquelle la phase dynamique de n'importe quelle trajectoire périodique est définie comme:

$$\Delta\phi_{dyn} = \int_0^T \langle\lambda|H|\lambda\rangle\, dt, \tag{B.28}$$

où $|\lambda\rangle$ est l'état quantique du système. Dans notre cas, on a $H = \frac{1}{2}\Big(\omega_1 S_x + \omega_2 S_y + \Delta S_z\Big)$, où les S_i sont les matrices de Pauli. L'état quantique est paramétré par les angles d'Euler suivant la formule (5.28) du chapitre 5 que nous rappelons ici:

$$|\lambda\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\frac{\psi}{2}} + i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\frac{\psi}{2}} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\frac{\psi}{2}} - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\frac{\psi}{2}} \end{pmatrix} e^{i\frac{\phi}{2}}. \tag{B.29}$$

En appliquant la formule (B.28), on obtient que la phase dynamique est donnée par le terme suivant:

$$\Delta\phi_{dyn} = 2ET - \Delta \int_0^T M_3(t)dt. \tag{B.30}$$

On peut donc retrouver les autres formules utilisées dans la littérature, comme la phase non-adiabatique utilisée dans [120, 119], ainsi que la phase de Berry. Celles-ci apparaissent lorsque $k = 1$, c'est-à-dire pour des solutions circulaires de type $M_3 = cst$. La variation de la phase s'écrit dans ce cas:

$$\Delta\phi = (2E - \Delta M_{3,0})T - 2\pi(1 - M_{3,0}), \tag{B.31}$$

où le terme $2\pi(1 - M_{3,0})$ est la surface encerclée par $\vec{M}(t)$ sur la sphère de Bloch. Dans le cas de la phase de Berry, les trajectoires sont adiabatiques, c'est-à-dire proche de la séparatrice. Dans ce cas, on a $M_3 \to \Delta$.

Cependant, dans notre cas, il semble plus pertinent de définir la phase dynamique d'une autre manière que l'équation (B.28). En effet, en substituant $M_3 = \sin\theta \sin\psi$ dans l'équation (B.27), et en manipulant ce terme, on peut montrer que la variation de la phase peut s'écrire sous la forme:

$$\Delta\phi = \left(2E - \frac{\Delta}{k^2}\right) T - \mathcal{A} + \frac{\Delta}{k^2} \int_{\theta_0}^{\theta_T} \frac{d\theta}{\cos\psi}. \tag{B.32}$$

Ainsi, on peut définir la partie dynamique comme $\left(2E - \frac{\Delta}{k^2}\right) T$, qui est un terme purement linéaire. L'intégrale restante est alors un autre terme géométrique, qui peut s'écrire sous la forme:

$$\frac{\Delta}{k^2} \int_{\theta_0}^{\theta_T} \frac{d\theta}{\cos\psi} = \frac{\Delta}{k^2} \int_{\theta_0}^{\theta_T} \int_0^{\psi} \frac{\sin\psi'}{\cos^2\psi'} d\psi' d\theta. \tag{B.33}$$

B.2.3 Intégration des trajectoires

Nous donnons dans ce paragraphe une méthode pour intégrer les trajectoires $\vec{M}(t)$. En utilisant le système (B.22), on peut montrer que la dynamique de la composante M_3 du vecteur de Bloch vérifie:

$$\dot{M}_3^2 = -k^2(M_3 - \alpha)(M_3 - \bar{\alpha})(M_3 - \beta)(M_3 - \bar{\beta}), \tag{B.34}$$

où les racines sont donnés par:

$$\begin{cases} \alpha = \frac{\Delta}{k^2} + \frac{1}{k^2}\sqrt{\Delta^2 - k^2(2E - k^2)}, \\ \bar{\alpha} = \frac{\Delta}{k^2} - \frac{1}{k^2}\sqrt{\Delta^2 - k^2(2E - k^2)}, \end{cases} \qquad \begin{cases} \beta = \Delta + \sqrt{\Delta^2 + 1 - 2E}, \\ \bar{\beta} = \Delta - \sqrt{\Delta^2 + 1 - 2E}. \end{cases} \tag{B.35}$$

La composante $M_3(t)$ vérifie donc l'équation suivante:

$$t + \rho = \int_{M_3(0)}^{M_3(t_f)} \frac{dx}{k\sqrt{|(x - \alpha)(x - \bar{\alpha})(x - \beta)(x - \bar{\beta})|}}. \tag{B.36}$$

Pour ce type d'intégrale, les solutions $M_3(t)$ peuvent toujours s'exprimer en termes de fonctions elliptiques de Jacobi, paramétrées par les racines du polynôme [152]. La forme générale dépend de l'ordre des racines. A titre d'exemple, considérons une trajectoire rouge de la figure B.5, qui soit de telle sorte que $E \geq \Delta$, et $\Delta > k^2$. Les racines sont alors organisées suivant la relation:

$$\bar{\beta} < M_3(t) < \beta < \bar{\alpha} < \alpha. \tag{B.37}$$

Finalement, la solution $M_3(t)$ est donnée par l'expression suivante:

$$M_3(t) = \alpha + \frac{\bar{\beta} - \alpha}{1 - \mu \,\mathrm{sn}^2(\omega t + \rho, m)}, \tag{B.38}$$

avec:

$$\mu = \frac{\beta - \bar{\beta}}{\beta - \alpha}, \quad m = \frac{(\beta - \bar{\beta})(\bar{\alpha} - \alpha)}{(\bar{\alpha} - \bar{\beta})(\beta - \alpha)}, \quad \omega = \frac{k}{2}\sqrt{(\beta - \alpha)(\bar{\alpha} - \bar{\beta})}. \tag{B.39}$$

B.2.4 Questions ouvertes

Ce modèle généralise celui que nous avons considéré dans le chapitre 5. Il comprend un grand nombre de trajectoires périodiques, dont celles généralement utilisées pour générer des portes phase géométriques. La formule (B.27) donne la variation de la phase sous une forme relativement simple. Cette formule généralise la phase de Montgomery, et permet de retrouver la phase de Berry ainsi que d'autres phases connues, en substituant $k = 1$ dans la formule. Cette phase peut être écrite sous une autre forme, donnée par l'équation (B.32). Sous cette forme, il semble possible d'annuler la partie dynamique en imposant $2E = \Delta/k^2$ dans la formule, ce qui suggère que l'on peut trouver un moyen de réaliser des portes phase géométriques en ne considérant qu'un seul cycle. Cependant, nous n'avons pas trouver d'interprétation géométrique pour le dernier terme de l'équation (B.32).

Il serait intéressant d'étudier le comportement du système au voisinage de la séparatrice, d'autant plus qu'il existe deux familles de séparatrices, une pour laquelle les points d'équilibre instable sont distincts, et l'autre pour laquelle ils sont confondus sur le pôle nord de la sphère. En particulier, existe-t-il des mouvements généralisant l'effet de la raquette de Tennis ?

Bibliographie

[1] A. E. Bryson and Y. C. Ho. *Applied Optimal Control: Optimization, Estimation, And Control*. CRC Press, 1975.

[2] B. Bonnard and M. Chyba. *Singular trajectories and their role in control theory*. Springer, 2003.

[3] U. Boscain, J. P. Gauthier, F. Rossi, and M. Sigalotti. *Approximate controllability, exact controllability, and conical eigenvalue intersections for quantum mechanical systems*. Comm. Math. Phys., 333:1225, 2015.

[4] L. Pontriaguine, V. Boltianski, R. Gamkrélidzé, and E. Michtchenko. *Théorie mathématique des processus optimaux*. MIR, 1974.

[5] E. Trélat. *Contrôle optimal, théorie et applications*. Vuibert, 2005.

[6] L. M. Hocking. *Optimal control: an introduction to the theory with applications*. Oxford University Press, 1991.

[7] M. Athans and P. L. Falb. *Optimal control: an introduction to the theory and its applications*. Courier Corporation, 1966.

[8] U. Boscain and B. Piccoli. *Optimal Syntheses for Control Systems on 2-D Manifolds*. Springer Berlin Heidelberg, 2003.

[9] H. J. Sussmann and J. C. Willems. *300 years of optimal control: from the brachystochrone to the maximum principle*. IEEE Cont. Syst., 17:32, 1997.

[10] J. Bernouilli. *Supplementum defectus geometriae cartesianae circa inventionem locorum*. Opera Johannis Bernoulli, 1696.

[11] R. V. Gamkrelidze. *Discovery of the Maximum Principle in Optimal Control*, page 160. Birkhäuser Basel, 2003.

[12] D. Dong and I. Petersen. *Quantum control theory and applications: A survey*. IET Cont. Th. Appl., 4:2651–2671, 2010.

[13] C. Sayrin, I. Dotsenko, X. Zhou, B. Peaudecerf, T. Rybarczyk, S. Gleyzes, P. Rouchon, M. Mirrahimi, H. Amini, M. Brune, J. M. Raimond, and S. Haroche. *Real-time quantum feedback prepares and stabilizes photon number states*. Nature, 477:73, 2011.

[14] M. Mirrahimi, P. Rouchon, and G. Turinici. *Lyapunov control of bilinear schrödinger equations*. Automatica, 41:1987, 2005.

[15] S. Kuang and S. Cong. *Lyapunov control methods of closed quantum systems.* Automatica, 44:98, 2008.

[16] D. J. Tannor and S. A. Rice. *Control of selectivity of chemical reaction via control of wave packet evolution.* J. Chem. Phys., 83:5013, 1985.

[17] M. Le Bellac. *A short introduction to Quatum Information and Quantum Computation.* Cambridge University Press, 2006.

[18] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum computation and quantum information.* Cambridge University Press, 2004.

[19] A. Zeilinger D. Bouwmeester, A. K. Ekert. *The Physics of Quantum Information: Quantum Cryptography, Quantum Teleportation, Quantum Computation.* Springer, 2000.

[20] M. H. Levitt. *Spin dynamics: basics of nuclear magnetic resonance.* Wiley, 2008.

[21] A. Wokaun R. R. Ernst, G. Bodenhausen. *Principles of nuclear magnetic resonance in one and two dimensions.* Clarendon Press; Oxford University Press, 1987.

[22] M. Décorps. *Imagerie de résonance magnétique: Bases physiques et méthodes.* EDP Sciences, 2011.

[23] T. Calarco, U. Dorner, P. S. Julienne, C. J. Williams, and P. Zoller. *Quantum computations with atoms in optical lattices: Marker qubits and molecular interactions.* Phys. Rev. A, 70:012306, 2004.

[24] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical recipes : the art of scientific computing.* Cambridge University Press, 2007.

[25] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. Schulte-Herbruggen, and S. J. Glaser. *Optimal control of coupled spin dynamics: design of NMR pulse sequences by gradient ascent algorithms.* J. Magn. Res., 172:296, 2005.

[26] D. M. Reich, M. Ndong, and C. P. Koch. *Monotonically convergent optimization in quantum control using krotov's method.* J. Chem. Phys., 136, 2012.

[27] L. Allen and J. H. Eberly. *Optical resonance and two-level atoms.* Wiley, 1975.

[28] F. T. Hioe. *Solution of bloch equations involving amplitude and frequency modulations.* Phys. Rev. A, 30:2100, 1984.

[29] N. V. Vitanov, T. Halfmann, B. W. Shore, and K. Bergmann. *Laser-induced population transfer by adiabatic passage techniques.* An. Rev. Phys. Chem., 52:763, 2001.

[30] K. A. Suominen and B. M. Garraway. *Population transfer in a level-crossing model with two time scales.* Phys. Rev. A, 45:374, 1992.

[31] A. Böhm, A. Mostafazadeh, H. Koizumi, Q. Niu, and J. Zwanziger. *The geometric phase in quantum systems : foundations, mathematical concepts, and applications in molecular and condensed matter physics.* Springer, 2003.

[32] B. R. Holstein. *The adiabatic theorem and berry's phase.* Am. J. Phys., 57:1079, 1989.

[33] R. Montgomery. *How much does the rigid body rotate? a berry's phase from the 18th century.* Am. J. of Phys., 59:394, 1991.

[34] J. Natário. *An elementary derivation of the montgomery phase formula for the euler top.* J. Geom. Mech., 2:113, 2010.

[35] D. Daems, A. Ruschhaupt, D. Sugny, and S. Guérin. *Robust quantum control by a single-shot shaped pulse.* Phys. Rev. Lett., 111:050404, 2013.

[36] A. Ruschhaupt, X. Chen, D. Alonso, and J. G. Muga. *Optimally robust shortcuts to population inversion in two-level quantum systems.* New J. Phys., 14:093040, 2012.

[37] D. D'alessandro. *Introduction to Quantum Control and Dynamics.* Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2008.

[38] S. J. Glaser, U. Boscain, T. Calarco, C. P. Koch, W. Köckenberger, R. Kosloff, I. Kuprov, B. Luy, S. Schirmer, T. Schulte-Herbrüggen, D. Sugny, and F. K. Wilhelm. *Training schrödinger's cat: quantum optimal control.* Eur. Phys. J. D, 69:1, 2015.

[39] V. Letokhov. *Laser control of atoms and molecules.* Oxford University Press, 2007.

[40] V. S. Letokhov. *Use of lasers to control selective chemical reactions.* Science, 180:451, 1973.

[41] E. Assémat, M. Lapert, D. Sugny, and S. J. Glaser. *On the application of geometric optimal control theory to nuclear magnetic resonance.* Math. Cont. Rel. Fields, 3:375, 2013.

[42] M. Garwood and L. DelaBarre. *The return of the frequency sweep: Designing adiabatic pulses for contemporary NMR.* J. Magn. Res., 153:155, 2001.

[43] D. J. Griffiths. *Introduction to quantum mechanics.* Benjamin Cummings, 2004.

[44] S. A. Goudsmit. *La découverte du spin de l'électron.* J. Phys. France, 28:123, 1967.

[45] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum mechanics.* Wiley, 1977.

[46] A. Bhattacharya. *Breaking the billion-hertz barrier.* Nature, 463:4, 2010.

[47] G. Lindblad. *Completely positive maps and entropy inequalities.* Comm. Math. Phys., 40:147, 1975.

[48] V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan. *Completely positive dynamical semigroups of n level systems.* J. Math. Phys., 17:821–825, 1976.

[49] M. Lapert, E. Assémat, S.J. Glaser, and D. Sugny. *Understanding the global structure of two-level quantum systems with relaxation: Vector fields organized through the magic plane and the steady-state ellipsoid.* Phys. Rev. A, 88:033407, 2013.

[50] J. A. Jones, V. Vedral, A. Ekert, and Giuseppe Castagnoli. *Geometric quantum computation using nuclear magnetic resonance.* Nature, 43:869, 2000.

[51] T. Nöbauer, A. Angerer, B. Bartels, M. Trupke, S. Rotter, J. Schmiedmayer, F. Mintert, and J. Majer. *Smooth optimal quantum control for robust solid-state spin magnetometry.* Phys. Rev. Lett., 115:190801, 2015.

[52] J. S. Li and N. Khaneja. *Control of inhomogeneous quantum ensembles.* Phys. Rev. A, 73:030302, 2006.

[53] Y. Zang. *Optimal Robust Pulse Design for Magnetic Resonance.* PhD thesis, Université technique de Munich, 2012.

[54] Malcolm H. Levitt. *Composite Pulses.* John Wiley & Sons, Ltd, 2007.

[55] F. Mintert, M. Lapert, Y. Zhang, S. J. Glaser, and D. Sugny. *Saturation of a spin-1/2 particle by generalized local control.* New J. Phys., 13:073001, 2011.

[56] M. Lapert, Y. Zhang, M. Braun, S.J. Glaser, and D. Sugny. *Singular extremals for the time-optimal control of dissipative spin $\frac{1}{2}$ particles.* Phys. Rev. Lett., 104:083001, 2010.

[57] B. Bonnard, O. Cots, S. J. Glaser, M. Lapert, D. Sugny, and Y. Zhang. *Geometric optimal control of the contrast imaging problem in nuclear magnetic resonance.* IEEE Trans. Auto. Cont., 57:1957, 2012.

[58] M. Lapert, Y. Zhang, M. Janich, S. J. Glaser, and D. Sugny. *Geometric optimal control of the contrast imaging problem in nuclear magnetic resonance.* IEEE Trans. Auto. Cont., 57:1957, 2012.

[59] K. Kobzar, S. Ehni, T. E. Skinner, S. J. Glaser, and B. Luy. *Exploring the limits of broadband 90° and 180° universal rotation pulses.* J. Magn. Res., 225:142, 2012.

[60] T. E. Skinner, N. I. Gershenzon, M. Nimbalkar, W. Bermel, B. Luy, and S. J. Glaser. *New strategies for designing robust universal rotation pulses: Application to broadband refocusing at low power.* J. Magn. Res., 216:7887, 2012.

[61] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information.* Cambridge University Press, 2000.

[62] A. K. Ekert. *Quantum cryptography based on bell's theorem.* Phys. Rev. Lett., 67:661, 1991.

[63] S. W. Peter. *Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer.* SIAM J. Comput., 26, 1997.

[64] E. Sjöqvist. *Trend: A new phase in quantum computation.* Physics, 1:35, 2008.

[65] E. Knill. *Quantum computing with realistically noisy devices.* Nature, 434:39, 2005.

[66] R. A. Minlos I. M. Gelfand and Z. Y. Shapiro. *Representations of the Rotation and Lorentz Groups and Their Applications.* Pergamon, 1963.

[67] S. Lloyd. *Almost any quantum logic gate is universal.* Phys. Rev. Lett., 75:346, 1995.

[68] X. Lacour. *Information Quantique par Passage Adiabatique: Portes Quantiques et Décohérence*. PhD thesis, Université de Bourgogne, 2007.

[69] V. Krotov. *Global methods in optimal control theory*. M. Dekker, 1996.

[70] T. Caneva, T. Calarco, and S. Montangero. *Chopped random-basis quantum optimization*. Phys. Rev. A, 84:022326, 2011.

[71] P. Doria, T. Calarco, and S. Montangero. *Optimal control technique for many-body quantum dynamics*. Phys. Rev. Lett., 106:190501, 2011.

[72] N. Khaneja, R. Brockett, and S. J. Glaser. *Time optimal control in spin systems*. Phys. Rev. A, 63:032308, 2001.

[73] R. W. Brockett. *Finite dimensional linear systems*. New York, Wiley, 1970.

[74] U. Boscain and B. Piccoli. An introduction to optimal control.

[75] V. Arnold. *Méthodes mathématiques de la mécanique classique*. MIR, 1976.

[76] M. Lapert. *Développement de nouvelles techniques de contrôle optimal en dynamique quantique: de la Résonance Magnétique Nucléaire à la physique moléculaire*. PhD thesis, Université de Bourgogne, 2011.

[77] B. Bonnard and D. Sugny. *Optimal Control with Applications in Space and Quantum Dynamics*. Aims, 2012.

[78] B. Bonnard, L. Faubourg, and E. Trélat. *Mécanique céleste et contrôle des véhicules spatiaux*. Springer Berlin Heidelberg, 2006.

[79] B. Bonnard, J. B. Caillau, and E. Trélat. Computation of conjugate times in smooth optimal control: The cotcot algorithm. page 929. Proceedings of the 44th IEEE Conference on Decision and Control and European Control Conference ECC 2005, 2005.

[80] D. E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley Professional, 1989.

[81] S. Sharma, H. Singh, and G. G. Balint-Kurti. *Genetic algorithm optimization of laser pulses for molecular quantum state excitation*. J. Chem. Phys., 132, 2010.

[82] H. F. Gray and R. J. Maxwell. Genetic programming optimisation of nuclear magnetic resonance pulse shapes. In *Proceedings of the First International Symposium on Medical Data Analysis*, page 242. Springer-Verlag, 2000.

[83] P. de Fouquieres, S.G. Schirmer, S.J. Glaser, and Ilya Kuprov. *Second order gradient ascent pulse engineering*. J. Magn. Res., 212:412, 2011.

[84] Y. Maday and G. Turinici. *New formulations of monotonically convergent quantum control algorithms*. J. Chem. Phys., 118:8191, 2003.

[85] G. Ciaramella, A. Borzì, G. Dirr, and D. Wachsmuth. *Newton methods for the optimal control of closed quantum spin systems*. SIAM J. Sci. Comp., 37:A319, 2015.

[86] R. Eitan, M. Mundt, and D. J. Tannor. *Optimal control with accelerated convergence: Combining the krotov and quasi-newton methods.* Phys. Rev. A, 83:053426, 2011.

[87] J. A. Jones. *Designing short robust not gates for quantum computation.* Phys. Rev. A, 87:052317, 2013.

[88] J. Pauly, P. Le Roux, D. Nishimura, and A. Macovski. *Parameter relations for the Shinnar-Le Roux selective excitation pulse design algorithm [NMR imaging].* IEEE Trans. Med. Im., 10:53, 1991.

[89] N. Khaneja. *On some model problems in quantum control.* Commun. Inf. Syst., 9:1.

[90] J. Snyman. *Practical mathematical optimization: an introduction to basic optimization theory and classical and new gradient-based algorithms.* Springer, 2005.

[91] J. W. Jerome and E. Polizzi. *Discretization of time-dependent quantum systems: real-time propagation of the evolution operator.* App. An., 93:2574, 2014.

[92] T. E. Skinner and N. I. Gershenzon. *Optimal control design of pulse shapes as analytical functions.* J. Magn. Res., 204:248, 2010.

[93] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Mechanics.* Pergamon Press, 1974.

[94] H. Golstein. *Classical Mechanics.* Addison-Wesley, 1950.

[95] M. Abramovitz and I. A. Stegun. *Handbook of mathematical functions.* Dover Publication, Inc., New York, 1964.

[96] N. A. Gershenfeld and I. L. Chuang. *Bulk spin-resonance quantum computation.* Science, 275:350–356, 1997.

[97] A. Garon, S. J. Glaser, and D. Sugny. *Time-optimal control of su(2) quantum operations.* Phys. Rev. A, 88:043422, 2013.

[98] G. Vidal, K. Hammerer, and J. I. Cirac. *Interaction cost of nonlocal gates.* Phys. Rev. Lett., 88:237902, 2002.

[99] T. O. Reiss, N. Khaneja, and S. J. Glaser. *Broadband geodesic pulses for three spin systems: time-optimal realization of effective trilinear coupling terms and indirect swap gates.* J. Magn. Res., 165:95–101, 2003.

[100] H. Yuan, R. Zeier, and N. Khaneja. *Elliptic functions and efficient control of ising spin chains with unequal couplings.* Phys. Rev. A, 77:032340, 2008.

[101] B. Bonnard, O. Cots, and N. Shcherbakova. *The serret-andoyer riemannian metric and euler-poinsot rigid body motion.* Math. Cont. Rel. Fields, 3:287, 2013.

[102] B. Bonnard, O. Cots, J. B. Pomet, and N. Shcherbakova. *Riemannian metrics on 2d-manifolds related to the euler-poinsot rigid body motion.* ESAIM: COCV, 20:864, 2014.

[103] U. Boscain, T. Chambrion, and G. Charlot. *Nonisotropic 3-level quantum systems: complete solutions for minimum time and minimum energy.* Disc. Cont. Dyn. Sys. B, 5:957, 2005.

[104] L. Van Damme, R. Zeier, S. J. Glaser, and D. Sugny. *Application of the pontryagin maximum principle to the time-optimal control in a chain of three spins with unequal couplings*. Phys. Rev. A, 90:013409, 2014.

[105] N. Khaneja, B. Heitmann, A. Spörl, H. Yuan, T. Schulte-Herbrüggen, and S.J. Glaser. *Shortest paths for efficient control of indirectly coupled qubits*. Phys. Rev. A, 75:012322, 2007.

[106] M. Nimbalkar, R. Zeier, J.L. Neves, S. B. Elavarasi, H. Yuan, N.Khaneja, K. Dorai, and S. J. Glaser. *Multiple-spin coherence transfer in linear ising spin chains and beyond: Numerically optimized pulses and experiments*. Phys. Rev. A, 85:012325, 2012.

[107] H. Yuan, S.J. Glaser, Steffen, and N. Khaneja. *Geodesics for efficient creation and propagation of order along ising spin chains*. Phys. Rev. A, 76:012316, 2007.

[108] N. Khaneja, S. J. Glaser, and R. Brockett. *Sub-riemannian geometry and time optimal control of three spin systems: Quantum gates and coherence transfer*. Phys. Rev. A, 65:032301, 2002.

[109] A. M. Perelomov. *Motion of four-dimensional rigid body around a fixed point: an elementary approach*. J. Phys. A: Math. Gen., 38:L801, 2005.

[110] L. Van Damme, P. Mardešić, and D. Sugny. *The tennis racket effect*. Physica D, arXiv:1606.08237, 2016.

[111] Wikipedia. Tennis racket theorem.

[112] M. S. Ashbaugh, C. C. Chicone, and R.H. Cushman. *The twisting tennis racket*. J. Dyn. Diff. Eq., 3:67, 1991.

[113] R. H. Cushman and L. M. Bates. *Global Aspects of Classical Integrable Systems*. Birkhäuser Basel, 1997.

[114] H. Brody. *The moment of inertia of a tennis racket*. Phys. Teach., 23:213, 1985.

[115] S. M. Nesbit, M. Elzinga, C. Herchenroder, and M. Serrano. *The effects of racket inertia tensor on elbow loadings and racket behavior for central and eccentric impacts*. J. Sports Sci. Med., 5:304, 2006.

[116] H. Brody. *Physics of the tennis racket*. Am. J. of Phys., 47:482, 1979.

[117] E. Assémat, M. Lapert, Y. Zhang, M. Braun, S.J. Glaser, and D. Sugny. *Simultaneous time-optimal control of the inversion of two spin-$\frac{1}{2}$ particles*. Phys. Rev. A, 82:013415, 2010.

[118] Y. Aharonov and J. Anandan. *Phase change during a cyclic quantum evolution*. Phys. Rev. Lett., 58:1593, 1987.

[119] S. L. Zhu and Z. D. Wang. *Universal quantum gates based on a pair of orthogonal cyclic states: Application to NMR systems*. Phys. Rev. A, 67:022319, 2003.

[120] Y. Ota, Y. Goto, Y. Kondo, and M. Nakahara. *Geometric quantum gates in liquid-state NMR based on a cancellation of dynamical phases.* Phys. Rev. A, 80:052311, 2009.

[121] A. Ekert, M. Ericsson, P. Hayden, H. Inamori, J. A. Jones, D. K. L. Oi, and V. Vedral. *Geometric quantum computation.* J. Mod. Opt., 47:2501, 2000.

[122] L. Van Damme, D. Leiner, P. Mardešić, S. J. Glaser, and D. Sugny. *The quantum tennis racket effect: Linking the rotation of a rigid body to the Schrödinger equation.* Submitted to Nature Physics (2016).

[123] X. Chen, E. Torrontegui, and J. G. Muga. *Lewis-riesenfeld invariants and transitionless quantum driving.* Phys. Rev. A, 83:062116, 2011.

[124] J. P. Demailly. *Analyse numérique et équations différentielles.* EDP SCIENCES, 2006.

[125] R. P. Brent. *Algorithms for minimization without derivatives.* Prentice-Hall, 1972.

[126] M. V. Berry. *Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes.* Proc. R. Soc. A, 392:45, 1984.

[127] X. B. Wang and K. Matsumoto. *Nonadiabatic conditional geometric phase shift with NMR.* Phys. Rev. Lett., 87:097901, 2001.

[128] S. L. Zhu and Z. D. Wang. *Implementation of universal quantum gates based on nonadiabatic geometric phases.* Phys. Rev. Lett., 89:097902, 2002.

[129] S. L. Zhu and Z. D. Wang. *Unconventional geometric quantum computation.* Phys. Rev. Lett., 91:187902, 2003.

[130] J. P. Dowling and G. J. Milburn . *Quantum technology: the second quantum revolution.* Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 361:1655, 2003.

[131] J. P. Home, D. Hanneke, J. D. Jost, J. M. Amini, D. Leibfried, and D. J. Wineland. *Complete methods set for scalable ion trap quantum information processing.* Science, 325:1227, 2009.

[132] A. M. Steane. *How to build a 300 bit, 1 giga-operation quantum computer.* Quantum Info. Comput., 7:171, 2007.

[133] P. Treutlein, T. W. Hänsch, J. Reichel, A. Negretti, M. A. Cirone, and T. Calarco. *Microwave potentials and optimal control for robust quantum gates on an atom chip.* Phys. Rev. A, 74:022312, 2006.

[134] M. A. Pravia, N. Boulant, J. Emerson, A. Farid, E. M. Fortunato, T. F. Havel, R. Martinez, and D. G. Cory. *Robust control of quantum information.* J. Chem. Phys., 119:9993, 2003.

[135] E. Barnes, X. Wang, and S. D. Sarma. *Control of inhomogeneous quantum ensembles.* Sci. Rep., 5:12685, 2006.

[136] P. Zou and Z. M. Zhang. *Robust quantum gates between trapped ions using shaped pulses.* Phys. Lett. A, 379:3045, 2015.

[137] J. A. Jones and L. Xiao. *Robust logic gates and realistic quantum computation.* Phys. Rev. A, 73:032334, 2006.

[138] G. T. Genov, D. Schraft, T. Halfmann, and N. V. Vitanov. *Correction of arbitrary field errors in population inversion of quantum systems by universal composite pulses.* Phys. Rev. Lett., 113:043001, 2014.

[139] D. Schraft, Thomas T. Halfmann, G. T. Genov, and N. V. Vitanov. *Experimental demonstration of composite adiabatic passage.* Phys. Rev. A, 88:063406, 2013.

[140] B. T. Torosov, S. Guérin, and N. V. Vitanov. *High-fidelity adiabatic passage by composite sequences of chirped pulses.* Phys. Rev. Lett., 106:233001, 2011.

[141] S. Guérin, S. Thomas, and H. R. Jauslin. *Optimization of population transfer by adiabatic passage.* Phys. Rev. A, 65:023409, 2002.

[142] X. Chen, I. Lizuain, A. Ruschhaupt, D. Guéry-Odelin, and J. G. Muga. *Shortcut to adiabatic passage in two- and three-level atoms.* Phys. Rev. Lett., 105:123003, 2010.

[143] L. Van Damme, D. Schraft, G. T. Genov, D. Sugny, T. Halfmann, and S. Guérin. *Robust not-gate by single-shot shaped pulses: Demonstration by rephasing of atomic coherences.* Submitted to Phys. Rev. Lett.

[144] N. C. Wong, E. S. Kintzer, J. Mlynek, R. G. DeVoe, and R. G. Brewer. *Raman heterodyne detection of nuclear magnetic resonance.* Phys. Rev. B, 28:4993, 1983.

[145] M. Nilsson, L. Rippe, S. Kröll, R. Klieber, and D. Suter. *Hole-burning techniques for isolation and study of individual hyperfine transitions in inhomogeneously broadened solids demonstrated in Pr^{3+}:Y_2SiO_5.* Phys. Rev. B, 70:214116, 2004.

[146] K. Holliday, M. Croci, E. Vauthey, and U. P. Wild. *Spectral hole burning and holography in an Y_2SiO_5:Pr^{3+} crystal.* Phys. Rev. B, 47:14741, 1993.

[147] F. Beil, J. Klein, G. Nikoghosyan, and T. Halfmann. *Electromagnetically induced transparency and retrieval of light pulses in a λ-type and a v-type level scheme in Pr^{3+}:Y_2SiO_5.* J. Phys. B, 41:074001, 2008.

[148] T. Caneva, M. Murphy, T. Calarco, R. Fazio, S. Montangero, V. Giovannetti, and G. E. Santoro. *Optimal control at the quantum speed limit.* Phys. Rev. Lett., 103:240501, 2009.

[149] I. L. Chuang G. H. Low, T. J. Yoder. *The methodology of composite quantum gates.* arXiv:1603.03996, 2016.

[150] W. Fraser. *A survey of methods of computing minimax and near-minimax polynomial approximations for functions of a single independent variable.* J. ACM, 12:295, July 1965.

[151] P. Lynch. *The dolph chebyshev window: A simple optimal filter.* Month. Weath. Rev., 125:655, 1997.

[152] M. Joyeux. *Classical dynamics of the 1:1, 1:2 and 1:3 resonance hamiltonians.* Chem. Phys., 203:281, 1996.

Contrôle optimal de la dynamique des spins:
Applications en Résonance Magnétique Nucléaire et en Information Quantique

Résumé: L'objectif de cette thèse est d'appliquer des méthodes de contrôle optimal en résonance magnétique nucléaire et en information quantique. Dans un premier temps, on introduit les domaines étudiés et la dynamique des modèles traités. On donne les outils nécessaires pour appliquer le principe du maximum de Pontryagin ainsi qu'un algorithme d'optimisation appelé GRAPE.
Le premier travail consiste à appliquer le PMP pour contrôler une chaîne de trois spins inégalement couplés. On étudie ensuite un problème de physique classique appelé "l'effet de la raquette de tennis", qui est un phénomène non-linéaire du modèle de la toupie d'Euler. On se sert de cette étude pour déterminer des lois de commande d'un système quantique à deux niveaux dans le chapitre suivant. Le dernier chapitre présente une méthode numérique qui permet d'améliorer la robustesse d'une porte NOT et de tester la pertinence de différentes approches analytiques déjà développées dans la littérature.

Mots clefs: contrôle optimal, résonance magnétique nucléaire, information quantique, contrôle quantique, toupie d'Euler, GRAPE, contrôle robuste.

Optimal control of spin-systems:
Applications to Nuclear magnetic Resonance and Quantum Information

Abstract: The goal of this thesis is to apply the optimal control theory to Nuclear Magnetic Resonance and Quantum Information. In a first step, we introduce the different topics and the dynamics of the analyzed systems. We give the necessary tools to use the Pontryagin Maximum Principle, and also an optimization algorithm, namely GRAPE.
The first work is an application of the PMP to the control of a three-spin chain with unequal couplings. We continue with the study of a classical problem called "the tennis racket effect", which is a non-linear phenomenon occuring during the free rotation of a three-dimensional rigid body. We use the results in the following chapter to determine some control laws for a two-level quantum system. The last chapter presents a numerical method which aims at improving the robustness of a quantum NOT gate and at investigating the efficiency of different analytical approaches proposed in the literature.

Key words: optimal control, nuclear magnetic resonance, quantum information, quantum control, free rotation of a rigid body, GRAPE, robust control.