Contrôle optimal : méthodes géométriques et numériques et applications au modèle de Bloch, et intégrabilité des géodésiques sous-riemanniennes

Irigo Edouard Zibo

▶ **To cite this version:**

Irigo Edouard Zibo. Contrôle optimal : méthodes géométriques et numériques et applications au modèle de Bloch, et intégrabilité des géodésiques sous-riemanniennes. Optimisation et contrôle [math.OC]. Normandie Université, 2021. Français. NNT : 2021NORMIR30 . tel-03630701

HAL Id: tel-03630701
https://theses.hal.science/tel-03630701

Submitted on 5 Apr 2022

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.

Normandie Université

THÈSE

Pour obtenir le grade de Docteur de Normandie Université

Spécialité Mathématiques Appliquées

l'École Doctorale Mathématiques, Information, Ingéniérie des Systèmes

Contrôle optimal : Méthodes géométriques et numériques et applications au modèle de Bloch, et Intégrabilité des géodésiques sous-riemanniennes.

Présentée par

Irigo Edouard ZIBO

Dirigée par Nicolas FORCADEL et Rachida EL ASSOUDI

Thèse soutenue le 30/11/2021 devant le jury composé de		
M. Ugo BOSCAIN	Directeur de Recherche CNRS, Sorbonne Université Paris VI	Rapporteur
Mme Rachida EL ASSOUDI	Maître de Conférences, INSA de Rouen	Co-encadrante de thèse
M. Ahmad EL HAJJ	Professeur, Université de technologie de Compiègne	Examinateur
M. Nicolas FORCADEL	Professeur, INSA de Rouen	Directeur de thèse
M. Yuri L. SACHKOV	Professeur, University of Pereslavl Russia	Rapporteur

INSA ROUEN NORMANDIE

MI∫IΣ

LMI - EA 3226

Remerciements

Je tiens à remercier de manière très chaleureuse mes responsables de thèse Rachida El ASSOUDI et Nicolas FORCADEL pour m'avoir offert la possibilité de réaliser ce travail de thèse. Ils ont dirigé ma thèse avec beaucoup de patience et de compréhension et ont consacré beaucoup de temps à mon travail en étant toujours disponible.

Par ailleurs, je remercie les professeurs Ugo BOSCAIN et Yuri L. SACHKOV qui m'ont fait l'honneur d'accepter de rapporter mon mémoire de thèse et de m'apporter des propositions de corrections. Je remercie également le professeur Ahmad EL HAJJ de m'avoir fait l'honneur d'être examinateur.

Tout mes remerciements à tous les membres du laboratoire LMI permanents ou doctorants que j'ai pus côtoyer pendant toutes ces années de thèse ainsi qu'aux responsables du laboratoire LMRS qui m'ont acceilli dans le Master MFA.

Je tiens à remercier toutes les personnes qui m'ont soutenu de près ou de loin dans des situations difficiles. Je remercie Marius chez qui j'ai habité pendant des années durant une bonne période de mes études supérieures. Je remercie de tout cœur Nelly TUYISHIME pour son aide. Toute ma gratitude envers Jean MAYALA qui m'a beaucoup soutenu. Je dis enfin merci Seigneur.

Mieux vaut la fin d'une chose que son commencement; mieux vaut un esprit patient qu'un esprit hautain.

Contents

Contents **5**

0.1 Introduction 8

1 Contrôle en temps minimal d'un modèle de Bloch. 15

1.1 Modèle de Bloch non linéaire 15

1.1.1 Modélisation cas général 15

1.1.2 Modèle à deux niveaux d'énergie 20

1.1.3 Modèle à trois niveaux d'énergie 23

1.1.4 Modèle à quatre niveaux d'énergie. 34

1.2 Contrôle en temps minimal 38

1.2.1 Principe de Maximum de Pontryagin 39

1.2.2 Synthèse en temps minimal pour un système en dimension deux . . 40

1.3 Contrôle en temps minimal pour un modèle à deux niveaux d'énergie . . . 45

1.3.1 Synthèse en temps minimal pour un système à deux niveaux avec un contrôle 48

1.4 Contrôle en temps minimal pour un modèle à trois niveaux d'énergie 59

1.4.1 Etude du cas paraboloïde 59

1.4.2 Étude du cas pseudo-matrice de densité 62

1.5 Analyse des trajectoires pour un modèle à quatre niveaux d'énergie 72

1.5.1 Symétrie et interaction dans la dynamique du système 73

1.5.2 Analyse de trajectoires extrémales 79

1.5.3 Conclusion et comparaison 81

2 Integrability of sub-Riemannian geodesic equations 87

2.1 Basic notions and notations 87

2.1.1 Odd-contact sub-Riemannian manifolds 89
2.1.2 Sub-Riemannian Lie groups and adjoint equations 90
2.2 Classification of 4-dimentional odd-contact sub-Riemannian Lie algebras . 92
2.2.1 Classification of odd-contact sub-symmetric spaces 93
2.2.2 Classification of odd-contact not sub-symmetric spaces 94
2.2.3 Adjoint geodesic equations 97
2.3 Integrability of the adjoint equations 97
2.3.1 First integrals 99
2.3.2 Solutions of adjoint geodesic equations 104
2.4 Engel sub-homogeneous spaces 107

0.1 Introduction

Ces dernières années ont été témoins d'intenses progrès dans le développement de la théorie du contrôle optimal, présente dans plusieurs domaines tels que la biologie, l'aérospatiale, la mécanique quantique et la chimie. Cette présence dans la résolution de différents problèmes théoriques et numériques liés à ces secteurs industriels, consiste en l'existence d'un certain coût qu'on souhaite garder le plus bas possible tout en contrôlant un système donné. Nous nous intéressons dans la première partie de cette thèse à un domaine important d'application de la théorie du contrôle optimal qui est le contrôle en temps minimal de systèmes quantiques à plusieurs niveaux d'énergie. Se sont des systèmes physiques étudiant et décrivant des phénomènes à l'échelle des électrons, des atomes, des molécules et des photons. L'intérêt grandissant des problèmes mathématiques associés aux systèmes quantiques est lié aux différents progrès réalisés dans la manipulation de ceux-ci pour les technologies existantes et futures. Ainsi au vue de ces progrès nous pouvons citer : les systèmes quantiques à deux niveaux (appelés bits quantiques ou qubits) qui sont d'une importance primordiale dans la mise en oeuvre de l'informatique quantique pour la génération optimale de qubits [NC00], les processus physiques comme le contrôle de la dynamique atomique et moléculaire dans le refroidissement laser des molécules, l'imagerie par résonance magnétique ([BS90] et [Lap11]), la manipulation du condensat de Bose-Einstein, la conception de puces atomiques et la séparation isotopique assistée par laser ([KSS89], [CTP90], [BS03], [RZ00] et [Let07]).

En outre, le contrôle de ces systèmes quantiques a offert une motivation à l'étude des systèmes de contrôle optimal sur des variétés différentiables de dimension finie. En effet, des méthodes de contrôle optimal issues de la géométrie différentielle et la dynamique hamiltonienne ont permis de résoudre un grand nombre de problèmes de difficulté croissante. Par exemple, dans [BM06] les auteurs considèrent le problème de transfert de population en temps minimum pour une particule de spin entraînée par un champ magnétique sur la sphère de Bloch où la dynamique de la population est influencée par un paramètre qui dépend de l'amplitude maximale du champ de contrôle et des niveaux d'énergie. Dans [SKJ07] est traité le problème de réaliser une synthèse optimale d'un système quantique dissipatif à deux niveaux d'énergie. Ensuite, dans [LAZ$^+$13] le problème de contrôle en temps minimal prenant en compte les termes dissipatifs et les effets

d'amortissement qui agissent sur la dynamique des populations est étudié. Dans [KBG01] les auteurs traitent le problème de contrôle en temps optimal des systèmes quantiques à spin. Tandis que dans [AA15] les auteurs réalisent une synthèse en temps minimal d'un système quantique à deux niveaux évoluant sur le groupe de Lie unitaire SU(2); puis dans [AA16] ils résolvent le problème de conduire simultanément, en temps minimal, N systèmes quantiques à deux niveaux soumis à des contrôles indépendants. Plusieurs autres travaux traitant des problèmes de contrôle optimal peuvent être trouvés par exemple dans ([BSS20], [KG02], [KG01] et [KGB02]).

Dans ce contexte, nous nous intéressons dans cette partie de la thèse à l'étude d'un problème de contrôle en temps minimal pour des systèmes quantiques donnés par des boîtes quantiques, qui sont des modèles de Bloch non-linéaire avec interaction et qui prennent en compte les paramètres de Coulomb. L'objectif dans ce travail est de mettre en avant le rôle perturbateur des énergies de Coulomb pendant un processus de transfert de population pour un système quantique à deux, trois ou quatre niveaux d'énergie.
Après la présentation du modèle de Bloch dans son aspect général donné par l'équation différentielle $i\hbar\dot{\rho} = [H + V(\rho), \rho]$, où l'état ρ est la matrice de densité, $V(\rho)$ est la matrice d'interaction de Coulomb et H est l'hamiltonien; nous mettons en évidence comment les paramètres dits de Coulomb peuvent influencer les fréquences de transition dans une boîte quantique. Ensuite on considère une boîte quantique comme un système quantique à deux, ou trois, ou quatre niveaux d'énergie. Dans chaque cas, une paramétrisation de la matrice de densité ρ vérifiant certaines propriétés physiques, permet d'écrire le modèle de Bloch comme un système affine en contrôle, qui évolue sur une sphère ou un cercle. Pour un système à deux niveaux la paramétrisation de ρ est en bijection avec le vecteur de Bloch, mais pour un système à trois niveaux il existe des géométries différentes et la paramétrisation n'est pas unique. Par ailleurs, pour un système à quatre niveaux on fait pour simplifier un choix de paramétrisation par blocs de systèmes à deux niveaux.

On introduit la théorie du contrôle optimal basée sur le principe de maximum de Pontryagin [PBG$^+$62]. Nous énonçons ensuite des concepts récemment développés en contrôle optimal géométrique [BP04] pour la construction des synthèses en temps minimal pour des systèmes de contrôle sur une variété de dimension deux.
Les résultats obtenus, associés aux différents cas considérés se présentent de la manière suivante : Pour un système quantique à deux niveaux d'énergie avec un contrôle, on ap-

plique le principe de maximum de Pontryagin pour étudier le temps minimum de transfert d'un état initial à un état final. On analyse sur la sphère de Bloch l'effet d'un paramètre de Coulomb plus grand (puis plus petit) que la fréquence de transition, sur la dynamique d'un électron lors d'un transfert de population.
Ensuite on présente une synthèse en temps minimum pour ces différents cas dans lesquels la fréquence de transition est influencée par un paramètre de Coulomb. On compare le temps minimum nécessaire de transfert pour le modèle étudié ici et celui du modèle à deux niveaux étudié dans [BM05] en présence du paramètre de Coulomb. Une partie de ces résultats a été publiée dans le Journal Montes Taurus Journal of Pure and Applied Mathematics 2020 [ZAF20] et présentée à la conférence MICOPAM 2019 : The 2nd Mediterranean International Conference of Pure & Applied Mathematics and Related Areas. Paris-France, August 28-31 2019 [EFZ19].
Pour un modèle d'une boîte quantique à trois niveaux d'énergie, des modélisations de systèmes quantiques en fonction de la géométrie donnée par la matrice densité et de la matrice d'interaction de Coulomb associée et de l'hamiltonien correspondant sont présentées. On détermine pour un système un temps minimum de transfert d'un état initial à un état final et on analyse le rôle que peut avoir les termes de Coulomb sur ce temps. En outre, on réalise une synthèse en temps minimal pour un autre système (appelé pseudo-système à deux niveaux) car les propriétés sont proches de celles d'un système à deux niveaux et on compare les deux études.
Pour une boîte quantique à quatre niveaux d'énergie, on donne une modélisation du système en fonction des paramètres d'interaction de Coulomb. Puis par un choix des énergies de l'hamiltonien, on obtient une symétrie dans la dynamique du système qui évolue sur une sphère de $\mathbb{R}^6$. On met en évidence l'interaction de Coulomb entre deux vecteurs de Bloch. Pour un cas simplifié de ce système quantique, on montre que les trajectoires obtenues s'expriment en fonction des fonctions elliptiques. Une brève synthèse en temps minimal est présentée.

Ce travail montre que l'étude géométrique et numérique du contrôle en temps minimal pour un système quantique à deux niveaux, qui a intéressé beaucoup d'auteurs, est plus simple que celle d'un système à trois ou quatre niveaux. Ceci est dû à la présence de plusieurs paramètres physiques de Coulomb caractérisant une boîte quantique et de termes qui représentent l'interaction entre les niveaux d'énergie.

On peut considérer le problème de contrôle en temps minimal pour le modèle de Bloch $i\hbar\dot{\rho} = [H + V(\rho), \rho]$ dans le cas général avec ρ une matrice complexe et appliquer une version du principe de maximum de Pontryagin sur l'ensemble de matrices complexes [Hun09]. Mais la difficulté pour cette étude est dans le fait que l'espace d'état n'est pas un groupe de matrice, et que la matrice de densité ρ est hermitienne, semi-définie positive et de trace un. Cette étude du cas général est laissée pour un futur travail.

L'interêt d'étudier des problèmes de contrôle optimal sur, des groupes de matrices, ou des groupes de Lie en général est considérable, comme pour le cas de deux niveaux sur le groupe spécial unitaire $SU(2)$ [AA15] ou sur le groupe spécial orthogonal $SO(3)$ [BC05].

Dans la seconde partie de cette thèse qui est indépendante de la première partie, on s'intéresse à un problème de contrôle optimal sur des groupes de Lie de dimension 4 avec une structure sous-riemannienne. La géométrie sous-riemannienne sur les groupes de Lie, dont les applications sont nombreuses, a suscité l'intérêt de nombreux auteurs. L'étude des propriétés d'intégrabilité de l'équation adjointe de Lie-Poisson sur les groupes de Lie sous-riemanniens et la classe des intégrales premières (polynomiales, rationnelles ou logarithmiques) présentent un grand intérêt. On sait que sur le groupe de Lie de Heisenberg nilpotent de dimensions 3, les solutions de l'équation adjointe de Lie-Poisson sont des fonctions trigonométriques. Le cas des groupes de Lie nilpotents d'ordre 2 a été étudié dans [12] et les solutions sont des polynômes trigonométriques. Cependant dans d'autres cas plus intéressants, les solutions s'expriment en fonction de fonctions elliptiques et de nombreux auteurs se sont intéressés aux fonctions elliptiques dans l'intégrabilité des problèmes sous-riemanniens [8, 18]. L'intégrabilité des équations géodésiques a été étudiée sur plusieurs groupes de Lie, par exemples sur $SO(4)$ et $SE(2)$ dans [1], sur $SL(2)$ et $SO(3)$ dans [7, 21], et sur d'autres groupes de Lie dans [9, 10, 14, 20, 24]. La super-intégrabilité sur des groupes de Lie de dimensions 3 unimodulaires a été étudiée dans [22].

Le but de cette partie est d'étudier les propriétés d'intégrabilité de l'équation adjointe de Lie Poisson sur $\mathfrak{g}^*$ le dual de $\mathfrak{g}$, l'algèbre de Lie de G, lorsque $(G, \mathscr{D}, \mathscr{B})$ est un groupe de Lie sous-riemannien de dimension 4 avec une distribution odd-contact ou d'Engel invariante à droite $\mathscr{D}$ et $\mathscr{B}$ une forme bilinéaire symétrique définie positive invariante à droite définie sur $\mathscr{D}$. Nous donnons premièrement la classification pour les groupes de Lie sous-riemanniens simplement connexes de dimensions 4 $(G, \mathscr{D}, \mathscr{B})$ avec une distribution odd-contact et nous donnons une nouvelle classe des espaces non sub-symétriques.

Pour cela, on considère l'algèbre de Lie sous-riemannienne associée $(\mathfrak{g},\mathfrak{p},\mathfrak{B})$ définie par $\mathfrak{g} = T_eG$ l'algèbre de Lie réelle de G, $\mathfrak{p}$ un sous-espace linéaire de $\mathfrak{g}$ de dimension 3 donné par $\mathfrak{p} = \mathscr{D}_e$ et $\mathfrak{B} = \mathscr{B}_e$ (la restriction de $\mathscr{B}$ à $\mathfrak{p} = \mathscr{D}_e$), qui est une forme bilinéaire symétrique définie positive sur $\mathfrak{p}$. Nous avons $\mathfrak{g} = \mathfrak{p} + [\mathfrak{p},\mathfrak{p}]$. Dans le cas où $[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}] \subset \mathfrak{p}$ on sait que l'espace sous-riemannien est symétrique et la classification a été faite par Falbel et Gorodski dans [17]. Aussi, l'intégrabilité des équations adjointes concernant les espaces sub-symétriques odd-contact a été étudiée dans [15].

Ici, nous allons compléter l'étude de l'intégrabilité des équations adjointes pour les espaces odd-contact et non sub-symétriques. Nous donnons la classification lorsque $[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}] \not\subset \mathfrak{p}$. On obtient des groupes de Lie sous-riemanniens dépendant des paramètres algébriques $a,b \in \mathbb{R}$ et $c > 0$, noté $G_{(a,b)}$. Ces paramètres, caractérisant le centre et le groupe de Lie dérivé, déterminent le type des intégrales premières (quadratiques, polynomiales ou logarithmiques). Nous montrons que le groupe de Lie sous-riemannien $G_{(0,0)}$ est symétrique, c'est-à-dire est le produit direct du revêtement universel de $SU(1,1)$ avec $\mathbb{R}$. $G_{(a,0)}$ avec $a \neq 0$ n'est pas symétrique, c'est le produit direct de $\mathbb{R}$ avec un espace non sub-symétrique donné par un groupe de Lie résoluble de dimension trois avec une distribution de contacts. De plus, nous montrons que $G_{(0,b)}$ avec $b \neq 0$ et $G_{(a,b)}$ avec $ab \neq 0$ sont des groupes de Lie réels résolubles à 4 dimensions et ils ne sont pas symétriques.

Notre résultat principal énonce que pour un espace sous-riemannien simplement connexe de dimensions 4 $(G,\mathscr{D},\mathscr{B})$ avec une distribution odd-contact, il existe une équivalence entre le fait que l'espace est symétrique et que l'équation adjointe admet trois intégrales premières quadratiques fonctionnellement indépendantes (Liouville-intégrable), et les solutions de l'équation adjointe sont des fonctions elliptiques. Sur tout espace non sub-symétrique $G_{(a,b)}$, $(a,b) \neq (0,0)$ nous montrons qu'il existe exactement deux intégrales premières quadratiques fonctionnellement indépendantes, et dans le cas $G_{(0,b)}$, $b \neq 0$ une intégrale première indépendante logarithmique existe, mais il n'y a pas d'intégrale première indépendante polynomiale (alors le système adjoint est super-intégrable). Dans le cas $G_{(a,b)}$, $a \neq 0$ et $b \in \mathbb{R}$ des intégrales premières polynomiales indépendantes existent pour des valeurs spécifiques des paramètres a et c satisfaisant des fonctions polynomiales en a et c (alors le système adjoint est Liouville-intégrable pour des valeurs spécifiques de a et c). Sur ces espaces non sub-symétriques les solutions de l'équation adjointe ne s'expriment toutes en fonction de fonctions elliptiques.

Une partie de ce travail concernant les solutions de l'équation adjointe qui ne sont pas des fonctions elliptiques [16] est publiée dans le proceedings de la conférence : 24th International Symposium on Mathematical Theory of Networks and Systems (MTNS 2020).

Enfin, puisque tous les espaces sub-symétriques d'Engel simplement connexes sont également des espaces sub-symétriques odd-contact [3], nous en déduisons que pour un espace sub-symétrique d'Engel simplement connexe de dimensions 4, l'équation adjointe admet trois intégrales premières quadratiques fonctionnellement indépendants et les solutions sont des fonctions elliptiques. D'autres problèmes sous-riemanniens sur le groupe d'Engel ont été étudié dans [5].

Chapter 1

Contrôle en temps minimal d'un modèle de Bloch.

1.1 Modèle de Bloch non linéaire

Dans cette première partie, on présente le modèle physique de Bloch non-linéaire dans le cas général. On rappelle les définitions et les résultats importants et nécessaires pour notre étude. Puis on écrit le modèle pour un système à deux, trois, ou quatre niveaux. Des paramétrisations de la matrice de densité donnent des systèmes affines en contrôle que nous considérons dans la suite pour étudier le problème de transfert en temps minimal.

1.1.1 Modélisation cas général

Les études sur la manipulation des systèmes quantiques ont fait naître plusieurs modèles permettant la description de certains phénomènes physiques. Par exemple, dans [Ham19] on étudie un système à température ambiante, l'état d'une molécule est alors décrit par un mélange statistique, via la matrice de densité et la dynamique du système est gouvernée par l'équation de Liouville-Von Neumann. Ensuite, on a les équations de Landau-Zener et de Lindblad qui décrivent l'évolution des systèmes quantiques interagissant avec leur environnement. L'équation de Landau-Zener est un système quantique qui modélise la dynamique d'une particule conduite par deux types de contrôles, un contrôle résultant de l'interaction entre un champ laser-particule (appelé contrôle cohérent) et un contrôle incohérent représentant les termes dissipatifs de la dynamique [MP19]. D'autre

part, l'équation de Lindblad décrit la dynamique dissipative des systèmes quantiques faiblement couplés avec leur environnement et qui ne présentent pas d'effet mémoire [Kon08]. Ensuite, on a le modèle de Bloch non-linéaire rencontré en résonance magnétique nucléaire [Lap11] qui modélise les termes dissipatifs et les effets d'amortissement se produisant pendant le processus de mesure de l'aimantation. Cette aimantation en effet est mesurée par une bobine, mais le signal mesuré dans cette bobine produit un autre champ magnétique qui influence la dynamique des particules. Cet effet est à l'origine du terme non-linéaire dans ce modèle de Bloch.

Nous présentons ici un modèle de Bloch non-linéaire qui prend en compte les effets coulombiens dans un système quantique appelé boîte quantique. Pour plus de détails sur les boîtes quantiques on peut se référer à ([Dup09] et [Pan17]). Les boîtes quantiques sont de très petites particules semi-conducteurs, de seulement quelques nanomètres dans lesquelles les électrons et les trous sont confinés dans les trois dimensions spatiales. Le confinement peut être réalisé en fabriquant le semi-conducteur en très petite taille, typiquement plusieurs centaines à plusieurs milliers d'atomes par particule. En raison des effets de confinement, les boîtes quantiques agissent comme des atomes artificiels, montrant des niveaux d'énergie discrets contrôlables. Ces niveaux d'énergie électroniques discrets sont disposés dans la bande de conduction et dans la bande de valence, formant un continuum d'énergie accessible. Les deux bandes sont séparées par une bande d'énergie interdite qui détermine la longueur d'onde requise pour l'absorption du rayonnement et le spectre d'émission. En effet, dans son état fondamental, un semi-conducteur a une bande de conduction sans électrons et une bande de valence pleine d'électrons. L'excitation avec un photon permet d'amener un électron de la bande de valence vers la bande de conduction (également appelée transition inter-bande), provoquant ainsi la création d'un état inoccupé dans la bande de valence. Cette vacance est en fait traitée comme l'apparition d'une particule à charge positive appelée trou. Pour les excitations énergétiques proches de l'énergie de la bande interdite, l'interaction de Coulomb est non négligeable, et l'électron et le trou photo-créés forment une paire liée (appelée exciton). La figure suivante donne la structure électronique d'une boîte quantique [Zri14] et permet de visualiser la position et le nombre de niveaux d'énergie accessible aux électrons dans une boîte quantique.

Dans [BK14] partant de la modélisation électron-trou et en considérant la représentation de Heisenberg [Hei26], les auteurs donnent une modélisation des boîtes quan-

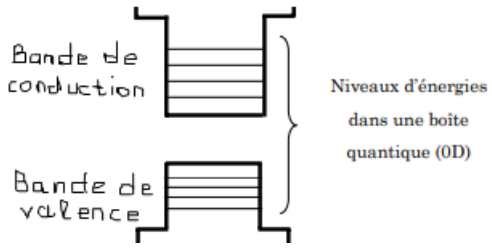

Figure 1.1: Niveaux d'énergie dans la bande de conduction et la bande de valence.

tiques qui contiennent N^c niveaux d'énergie dans la bande de conduction et N^v niveaux d'énergie dans la bande de valence. Cette modélisation conduit à une équation de type Bloch non-linéaire dont les termes non-linéaire proviennent de l'interaction de Coulomb.

Ce modèle non-linéaire est donné [BK14] de la manière suivante :

$$i\hbar\dot{\rho} = [H + V(\rho), \rho]$$

où $\hbar$ est la constante de Planck, (nous considérons $\hbar = 1$ par commodité dans les calculs), ρ est la matrice de densité, H est l'hamiltonien du système et $V(\rho)$ est la matrice d'interaction de Coulomb. La matrice de densité s'écrit par bloc sous la forme suivante (on peut avoir plus de détails principalement dans [BK14] et pour ses propriétés on peut aussi consulter [KZ06] et [Mes99])

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho^c & \rho^{cv} \\ \rho^{vc} & \rho^v \end{pmatrix},$$

avec $\rho^{vc} = \overline{\rho^{cv}}^t$ ($\overline{\rho^{cv}}^t$ représente la transposée de la matrice conjuguée de ρ^{cv}). ρ^v_{jj} est la probabilité d'occupation des électrons dans l'état j dans la bande de valence, $j \in I^v$, où I^v est l'ensemble contenant N^v niveaux d'énergie. ρ^c_{jj} est la probabilité d'occupation des électrons dans l'état j dans la bande de conduction, $j \in I^c$, où I^c est l'ensemble contenant N^c niveaux d'énergie. Pour $j \neq k$, $|\rho^v_{jk}|$, $|\rho^c_{jk}|$ et $|\rho^{cv}_{jk}|$ représentent respectivement les probabilités de transition intra-bande et inter-bande.

La matrice ρ a les propriétés physiques suivantes : elle est de trace égale à un, hermitienne $\rho = \overline{\rho}^t$ et elle est semi-définie positive (toutes les valeurs propres de ρ sont positives). On dit qu'une matrice de densité représente des états quantiques purs et mixtes si et seulement si la trace de ρ^2 est inférieure ou égale à un.

La matrice $H=H_0+H_L$ est l'hamiltonien total du système considéré, où H_0 est l'hamiltonien de l'énergie libre dans la boîte quantique et H_L est l'hamiltonien d'interaction laser-boîte

quantique. Ils sont donnés par :

$$H_0 = diag(E_1^c, ..., E_{N^c}^c, E_1^v, ..., E_{N^v}^v),$$

avec $(E_i^c)_{i\in I^c}$ et $(E_j^v)_{j\in I^v}$ sont des nombres réels représentant les énergies libres des électrons dans la bande de conduction et dans la bande de valence respectivement.

$$H_L = \begin{pmatrix} 0 & E(t)M \\ \overline{E(t)M} & 0 \end{pmatrix},$$

où $E(t)$ représente le champ électrique et M la matrice dipolaire.

Pour donner la matrice $V(\rho)$ d'interaction de Coulomb, on va définir dans ce qui suit les paramètres de Coulomb. On va s'intéresser à leur influence sur les niveaux d'énergie dans une boîte quantique, par conséquent sur la dynamique des particules.

La fréquence de transition inter-bande des boîtes quantiques est l'énergie

$$E_{kj} = E_j^c - E_k^v,$$

cette énergie correspond à celle des paires électrons-trous lorsqu'on néglige l'interaction de Coulomb. Par ailleurs, la prise en compte de l'interaction de Coulomb modifie les niveaux d'énergie en faisant par exemple tendre ceux-ci vers le bas. Ce phénomène est bien modélisé dans [FFW$^+$99] par

$$E_{kj} = E_j^c - E_k^v - R_{jkjk}^{c-v},$$

où le terme R_{jkjk}^{c-v} représente les interactions de Coulomb appelées interactions directes de Coulomb que nous allons définir. Ces effets coulombiens sur les niveaux d'énergie correspondent donc à des modifications des fréquences de transition inter-bandes. Plusieurs autres études décrivant les effets des paramètres de Coulomb sur les énergies de transition ont été effectuées dans ([FZ97], [FZ98], [FWF$^+$98] et [WF01]).
Les modifications de fréquences de transition inter-bandes agissent sur la longueur d'onde électromagnétique capable d'exciter les niveaux quantiques des boîtes, par conséquent elles perturbent en retardant ou en précipitant le transfert de population d'une bande à une autre bande. Cela est la principale motivation des problèmes de contrôle en temps minimum considérés.

Nous supposons le long de notre étude qu'on utilise un rayonnement laser modélisé par un champ électromagnétique en résonance avec la différence d'énergie $E_j^c - E_k^v$ entre les états excité et fondamental du système. D'un point de vue physique, appliquer des champs de contrôle résonnants signifie qu'on utilise des lasers oscillant avec une fréquence (par exemple ω_{kj}) égale à la différence d'énergie ($\omega_{kj} = E_j^c - E_k^v$). La raison de cette restriction est que dans les problèmes de contrôle considérés les trajectoires conduisant le système d'un état initial à un état final correspondent à des contrôles en résonance avec la différence d'énergie.

La matrice $V(\rho)$ d'interaction de Coulomb est hermitienne et elle s'écrit par bloc (pour plus de détails voir [BK14]) sous la forme générale suivante :

$$V(\rho) = \begin{pmatrix} \Lambda^c + \zeta^v + \eta^{c-v} & \gamma^{c-v} \\ \gamma^{v-c} & \Lambda^v + \zeta^c + \kappa^v \end{pmatrix},$$

pour N^c niveaux d'énergie dans la bande de conduction et N^v niveaux dans la bande de valence. Chaque élément de la matrice $V(\rho)$ s'écrit de la manière suivante en fonction des paramètres de Coulomb,

$$\begin{cases} \Lambda^c_{jk} = 2\sum_{\alpha,\alpha' \in I^c} (R^c_{j\alpha k\alpha'} - R^c_{j\alpha\alpha' k})\rho^c_{\alpha'\alpha} \quad j,k \in I^c. \\ \Lambda^v_{jk} = 2\sum_{\alpha,\alpha' \in I^v} (R^v_{j\alpha k\alpha'} - R^v_{j\alpha\alpha' k})\rho^v_{\alpha'\alpha} \quad j,k \in I^v. \\ \zeta^v_{jk} = \sum_{\alpha,\alpha' \in I^v} R^{c-v}_{j\alpha k\alpha'}\rho^v_{\alpha'\alpha} \quad j,k \in I^c. \\ \zeta^c_{jk} = \sum_{\alpha,\alpha' \in I^c} R^{c-v}_{\alpha j\alpha' k}\rho^c_{\alpha'\alpha} \quad j,k \in I^v. \\ \gamma^{c-v}_{jk} = -\sum_{(\alpha,\alpha') \in I^v \times I^c} R^{c-v}_{j\alpha\alpha' k}\rho^{cv}_{\alpha'\alpha} \quad (j,k) \in I^c \times I^v. \\ \eta^{c-v}_{jk} = -\sum_{\alpha \in I^v} R^{c-v}_{j\alpha k\alpha} \quad j,k \in I^c. \\ \kappa^v_{jk} = 2\sum_{\alpha \in I^v} (R^v_{\alpha jk\alpha} - R^v_{\alpha j\alpha k}) \quad j,k \in I^v. \end{cases} \tag{1}$$

Les paramètres R^b_{mnpq}, pour $b \in \{c, v, c-v, v-c\}$ et $m,n,p,q \in I^c \cup I^v$ sont les paramètres de Coulomb. Ils sont définis [BK14] par, pour $b, b' \in \{c, v\}$ avec $b \neq b'$

$$R^b_{mnpq} = \frac{N^2}{2} \int\int \overline{\Psi^b_m}(r)\overline{\Psi^b_n}(r')V^b(r,r')\Psi^b_q(r')\Psi^b_p(r)drdr',$$

$$R^{b-b'}_{mnpq} = N^2 \int\int \overline{\Psi^b_m}(r)\overline{\Psi^{b'}_n}(r')V^{b-b'}(r,r')\Psi^{b'}_q(r')\Psi^b_p(r)drdr',$$

où r' et r sont les positions des particules en interaction et les fonctions $V^b(r,r')$ et $V^{b-b'}(r,r')$ sont des fonctions réelles appelées potentiels de Coulomb. Elles sont définies par $V^b(r,r') = -V^{b-b'}(r,r') = \frac{K}{|r-r'|}$; où K est la *constante de Coulomb* réelle. Ψ^b_l, avec $l \in \{m,n,p,q\}$ sont les fonctions décrivant les différents états propres électroniques. N est un entier positif pour un système quantique à N excitons.

Il est clair que si $m = p$ et $n = q$ alors R^b_{mnpq} et $R^{b-b'}_{mnpq}$ sont réels donnés par :

$$R^b_{mnmn} = \frac{N^2}{2}\int\int |\Psi^b_m(r)|^2|\Psi^b_n(r')|^2V^b(r,r')drdr',$$

$$R^{b-b'}_{mnmn} = N^2\int\int |\Psi^b_m(r)|^2|\Psi^{b'}_n(r')|^2V^{b-b'}(r,r')drdr'.$$

Ces paramètres vérifient les propriétés suivantes lorsqu'on permute des indices parmi $\{m,n,p,q\}$.

Proposition 1.1.1. *Les paramètres de Coulomb vérifient :*

1) $R^b_{nmpq} = R^b_{mnqp} \quad pour \quad chaque \quad b \in \{c,v\}$,

2) $R^{v-c}_{nmqp} = R^{c-v}_{mnpq}$

3) $\overline{R^b}_{mnpq} = \overline{R^b}_{pqmn} \quad et \quad R^{b-b'}_{mnpq} = \overline{R^{b-b'}_{pqmn}} \quad pour \quad b,b' \in \{c,v\}$ *avec* $b \neq b'$.

Pour une boite quantique avec deux, trois ou quatre niveaux d'énergie, on va choisir une paramétrisation de la matrice de densité ρ et on va écrire la matrice d'interaction de Coulomb associée V(ρ) ainsi que l'hamiltonien H puis en écrivant le modèle $i\dot{\rho} = [H + V(\rho), \rho]$, on obtiendra des systèmes de contrôles affines qui mettent en évidence les effets des paramètres de Coulomb sur les fréquences de transition inter-bandes.

1.1.2 Modèle à deux niveaux d'énergie

On présente dans cette partie un modèle d'une boite quantique à deux niveaux d'énergie. On considère le premier niveau dans la bande de conduction et le deuxième niveau dans

la bande de valence, ($i.e$, $I^c = \{1\}$ et $I^v = \{2\}$). Les matrices de densité, l'hamiltonien et d'interaction de Coulomb ρ, H et V(ρ) s'écrivent dans ce cas sous la forme suivante :

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11}^c & \rho_{12}^{cv} \\ \rho_{21}^{vc} & \rho_{22}^v \end{pmatrix},$$

où $\rho_{21}^{vc} = \overline{\rho_{12}^{cv}}$ et $|\rho_{12}^{cv}|$ et $|\rho_{21}^{vc}|$ sont les probabilités de transition entre les niveaux 1 et 2 appelées aussi cohérences; ρ_{11}^c et ρ_{22}^v sont les probabilités d'occupation des électrons des niveaux 1 et 2. Et on a, $\rho_{11}^c + \rho_{22}^v = 1$.
Pour donner l'hamiltonien du système on se place dans le cas où la boîte quantique est placée dans un rayonnement laser modélisé par un champ électromagnétique. Dans ce cas l'hamiltonien s'écrit

$$H = \begin{pmatrix} E_1^c & \omega_1(t) + i\omega_2(t) \\ \omega_1(t) - i\omega_2(t) & E_2^v \end{pmatrix},$$

où E_1^c et E_2^v sont les énergies libres pour la bande de conduction et la bande de valence respectivement. On écrit $E(t)M = \omega_1(t) + i\omega_2(t)$, où les fonctions ω_1 et ω_2 sont des fonctions de contrôle réelles qui sont supposées être bornées. $E(t)$ est le champs électrique et M l'opérateur moment dipolaire.

Pour la matrice V(ρ) d'interaction de Coulomb, en utilisant la forme générale du modèle, et les coefficients donnés par (1) on détermine les coefficients suivants de cette matrice, pour ce cas à deux niveaux d'énergie et on trouve :

$$\begin{cases} \Lambda_{11}^c = 2(R_{1111}^c \rho_{11}^c - R_{1111}^c \rho_{11}^c) = 0, \quad j,k,\alpha,\alpha' \in I^c = \{1\} \\ \Lambda_{22}^v = 2(R_{2222}^c \rho_{22}^v - R_{2222}^c \rho_{22}^v) = 0, \quad j,k,\alpha,\alpha' \in I^v = \{2\} \\ \zeta_{11}^v = R_{1212}^{c-v} \rho_{22}^v, \quad j,k \in I^c = \{1\} \quad et \quad \alpha \in I^v = \{2\} \\ \zeta_{22}^c = R_{1212}^{c-v} \rho_{11}^c, \quad j,k \in I^v = \{2\} \quad et \quad \alpha \in I^c = \{1\} \\ \gamma_{12}^{c-v} = -R_{1212}^{c-v} \rho_{12}^{cv}, \quad (j,k) \in I^c \times I^v = \{1\} \times \{2\} \quad et \quad (\alpha,\alpha') \in I^v \times I^c = \{2\} \times \{1\} \\ \eta_{11}^{c-v} = R_{1212}^{c-v}, \quad j,k \in I^c = \{1\} \quad et \quad \alpha \in I^v = \{2\} \\ \kappa_{22}^v = 2(R_{2222}^v - R_{2222}^v) = 0, \quad j,k,\alpha \in I^v = \{2\}. \end{cases}$$

Par conséquent la matrice d'interaction de Coulomb s'écrit :

$$V(\rho) = \begin{pmatrix} R^{c-v}_{1212}\rho^{v}_{22} - R^{c-v}_{1212} & -R^{c-v}_{1212}\rho^{cv}_{12} \\ -R^{c-v}_{1212}\rho^{vc}_{21} & R^{c-v}_{1212}\rho^{c}_{11} \end{pmatrix} = -R^{c-v}_{1212}\begin{pmatrix} 1-\rho^{v}_{22} & \rho^{cv}_{12} \\ \overline{\rho^{cv}_{12}} & -\rho^{c}_{11} \end{pmatrix}.$$

On pose pour la suite $R = R^{c-v}_{1212}$ une constante réelle (car $V(\rho)$ est hermitienne) et comme $trace(\rho) = \rho^{c}_{11} + \rho^{v}_{22} = 1$, on obtient

$$V(\rho) = -R\begin{pmatrix} \rho^{c}_{11} & \rho^{cv}_{12} \\ \overline{\rho^{cv}_{12}} & -\rho^{c}_{11} \end{pmatrix}.$$

Paramétrisation d'un modèle à deux niveaux d'énergie

Maintenant on utilise une paramétrisation de la matrice de densité du modèle à deux niveaux d'énergie [BMM12]. Puisque l'état est représenté par une matrice de densité ρ qui est hermitienne, semi-définie positive et de trace égale à un, on peut écrire

$$\rho = x_0 I_2 + x_1\sigma_1 + x_2\sigma_2 + x_3\sigma_3,$$

où pour $i \in \{1,2,3\}$, les x_i sont des réels et les σ_i sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad et \quad \sigma_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

I_2 est la matrice identité, avec les matrices de Pauli, elles forment une base de l'espace vectoriel réel des matrices hermitiennes $(2,2)$. Comme $trace(\rho) = 2x_0$, on a $x_0 = \frac{1}{2}$ et on obtient

$$\rho(x) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & 1-x_3 \end{pmatrix},$$

les valeurs propres de ρ sont $\lambda_1 = \frac{1}{2}(1 + \|x\|)$ et $\lambda_2 = \frac{1}{2}(1 - \|x\|)$. Il est clair que $\lambda_1 \geq \frac{1}{2}$, et que λ_2 est positive si et seulement si $\|x\| \leq 1$. Par conséquent l'ensemble sur lequel les valeurs propres de ρ sont positives est la boule unité $\{x \in \mathbb{R}^3, \|x\| \leq 1\}$. Le vecteur $x = (x_1, x_2, x_3)^t$ est appelé vecteur de Bloch et réside sur ou à l'intérieur de la sphère de Bloch. Il existe une bijection entre la matrice de densité ρ et le vecteur de Bloch, et il est clair que les coefficients de la matrice ρ s'expriment en fonction des variables du vecteur de Bloch de la façon suivante

$$x_1 = \rho_{12}^{cv} + \overline{\rho_{12}^{cv}}, \quad x_2 = Im(\overline{\rho_{12}^{cv}} - \rho_{12}^{cv}) \quad et \quad x_3 = 2\rho_{11}^{c} - 1.$$

Par ailleurs, on trouve que $trace(\rho^2) = \frac{1}{2}(1 + \| x \|^2)$ et on a $trace(\rho^2) \leq 1$ pour tout $x \in \mathbb{R}^3$ tel que $\|x\| \leq 1$. Si pour tout x, on a $\|x\| = 1$ cela signifie que tous les états purs du système sont sur la sphère de Bloch S^2.

Maintenant on écrit l'équation du modèle $i\dot{\rho} = [H + V(\rho), \rho]$ dans le cas à deux niveaux. Le calcul du crochet de matrices $[H + V(\rho), \rho] = (H + V(\rho))\rho - \rho(H + V(\rho))$ donne le système suivant :

$$(\Sigma_0) \begin{cases} \dot{\rho}_{11}^{c} = \omega_1(t)(\rho_{21}^{vc} - \rho_{12}^{cv}) + i\omega_2((\rho_{21}^{vc} + \rho_{12}^{cv}) \\ \dot{\rho}_{12}^{cv} = ((E_1^c - E_2^v) - R)\rho_{12}^{cv} + (\omega_1(t) + i\omega_2)(\rho_{22}^{v} - \rho_{11}^{c}) \\ \dot{\rho}_{21}^{vc} = ((E_2^v - E_1^c) + R)\rho_{21}^{vc} + (\omega_1(t) - i\omega_2)(-\rho_{22}^{v} + \rho_{11}^{c}) \\ \dot{\rho}_{22}^{v} = \omega_1(t)(\rho_{12}^{cv} - \rho_{21}^{vc}) - i\omega_2((\rho_{21}^{vc} + \rho_{12}^{cv}) \end{cases}$$

En utilisant les relations précédentes entre les coordonnées du vecteur de Bloch x_i, $1 \leqslant i \leqslant 3$ et les coefficients de la matrice ρ on a

$$\dot{x}_1 = \dot{\rho}_{12}^{cv} + \overline{\dot{\rho}_{12}^{cv}}, \; \dot{x}_2 = Im(\overline{\dot{\rho}_{12}^{cv}} - \dot{\rho}_{12}^{cv}) \text{ et } \dot{x}_3 = 2\dot{\rho}_{11}^{c}.$$

On pose $u_1(t) = 2\omega_1(t)$ et $u_2(t) = 2\omega_2(t)$. On obtient en utilisant (Σ_0) le système suivant exprimé en fonction du vecteur de Bloch.

$$(\Sigma_1) \quad \begin{cases} \dot{x}_1 = (E_2^v - E_1^c + R)x_2 - u_2 x_3 \\ \dot{x}_2 = (E_1^c - E_2^v - R)x_1 - u_1 x_3 \\ \dot{x}_3 = u_1 x_2 + u_2 x_1. \end{cases}$$

Clairement, on a $x_1\dot{x}_1 + x_2\dot{x}_2 + x_3\dot{x}_3 = 0$ et donc $\|x(t)\|^2 = \|x(0)\|^2$ pour tout $t \geq 0$ et pour tous contrôles u_1 et u_2. Si $\| x(0) \| = 1$ alors $x(t) \in S^2$.
Rappelons que $E_1^c - E_2^v$ est la fréquence de transition inter-bande et $R = R_{1212}^{c-v}$ est le paramètre de Coulomb. Le terme $E_1^c - E_2^v - R$, sert à l'étude des effets coulombiens sur la dynamique des particules pour le système (Σ_1).

1.1.3 Modèle à trois niveaux d'énergie

La principale différence entre un système à deux niveaux et un système à trois niveaux se trouve dans la paramétrisation de la matrice de densité ρ. Dans le cas d'un système

à deux niveaux, la condition disant que ρ est semi-définie positive permet de montrer que ρ, représentant les états purs et mixtes, est en bijection avec les points de la boule unité dans R^3 (le vecteur de Bloch). On a donc une seule géométrie représentant les états purs et mixtes. Dans le cas d'un système à trois niveaux la situation est différente, cette condition conduit à plusieurs types de géométries qui ont été étudiées et classifiées dans [GSS16] et la paramétrisation mathématique de la matrice de densité dans ce cas n'est pas unique. Nous allons donner les formes géométriques faisant ressortir des matrices de densité semi-définies positives. On présentera après une classe intéressante de matrice de densité représentant des pseudo-états quantiques d'un système à deux niveaux, appelée pseudo-matrice de densité [KKL16].

On considère une boite quantique à trois niveaux d'énergie. On prend le premier niveau dans la bande de conduction donc $I^c = \{1\}$; le deuxième et le troisième niveaux dans la bande de valence donc $I^v = \{2,3\}$. On va écrire le modèle dans ce cas.
La forme de la matrice de densité s'écrit

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho^c_{11} & \rho^{cv}_{12} & \rho^{cv}_{13} \\ \overline{\rho^{cv}_{12}} & \rho^v_{22} & \rho^v_{23} \\ \overline{\rho^{cv}_{13}} & \overline{\rho^v_{23}} & \rho^v_{33} \end{pmatrix}.$$

L'expression de la matrice d'interaction de Coulomb s'écrit sous la forme

$$V(\rho) = \begin{pmatrix} V^c_{11} & V^{cv}_{12} & V^{cv}_{13} \\ \overline{V^{cv}_{12}} & V^v_{22} & V^v_{23} \\ \overline{V^{cv}_{13}} & \overline{V^v_{23}} & V^v_{33} \end{pmatrix}, \quad avec$$

$$\begin{cases} V^c_{11} = \Lambda^c_{11} + \zeta^v_{11} + \eta^{c-v}_{11} = 2R^{c-v}_{1213} Rel(\rho^v_{23}) + R^{c-v}_{1212}(\rho^v_{22} - 1) + R^{c-v}_{1313}(\rho^v_{33} - 1) \\ V^v_{22} = \Lambda^v_{22} + \zeta^c_{22} + \kappa^v_{22} = 2(R^v_{2323} - R^v_{2332})(\rho^v_{33} - 1) + R^{c-v}_{1212}\rho^c_{11} \\ V^v_{33} = \Lambda^v_{33} + \zeta^c_{33} + \kappa^v_{33} = 2(R^v_{3232} - R^v_{3223})(\rho^v_{22} - 1) + R^{c-v}_{1313}\rho^c_{11} \\ V^v_{23} = \Lambda^v_{23} + \zeta^c_{23} + \kappa^v_{23} = 2(R^v_{2332} - R^v_{2323})\rho^v_{23} + R^{c-v}_{1213}\rho^c_{11} \\ V^{cv}_{12} = \gamma^{c-v}_{12} = -(R^{c-v}_{1212}\rho^{cv}_{12} + R^{c-v}_{1312}\rho^{cv}_{13}) \\ V^{cv}_{13} = \gamma^{c-v}_{13} = -(R^{c-v}_{1213}\rho^{cv}_{12} + R^{c-v}_{1313}\rho^{cv}_{13}). \end{cases}$$

Les paramètres de Coulomb sont tous des réels, car on sait que R^b_{mnmn} pour $b \in \{c, v\}$ et

R^{c-v}_{mnmn} sont réels et puisque les matrices ρ et V(ρ) sont hermitiennes, les coefficients de leurs diagonales sont réels. En utilisant les propriétés données dans la *proposition 1.1.1*, on obtient les relations suivantes :

$$R^{c-v}_{1213} = R^{c-v}_{1312} \quad , \quad R^{v}_{2323} = R^{v}_{3232} \quad et \quad R^{v}_{3223} = R^{v}_{2332}.$$

Pour simplifier les notations on pose pour la suite,

$$b_1 = R^{c-v}_{1213} = R^{c-v}_{1312} \quad , \quad b_2 = R^{c-v}_{1212} \quad , \quad b_3 = R^{c-v}_{1313} \quad , \quad b_4 = R^{v}_{2323} = R^{v}_{3232}$$
$$et \quad b_5 = R^{v}_{3223} = R^{v}_{2332}.$$

Et on obtient la matrice V(ρ) qui s'écrit sous la forme suivante :

V(ρ) =
$$\begin{pmatrix} 2b_1 Rel(\rho^v_{23}) + b_2(\rho^v_{22} - 1) + b_3(\rho^v_{33} - 1) & -b_2\rho^{cv}_{12} - b_1\rho^{cv}_{13} & -b_1\rho^{cv}_{12} - b_3\rho^{cv}_{13}) \\ -b_2\overline{\rho^{cv}_{12}} - b_1\overline{\rho^{cv}_{13}} & 2(b_4 - b_5)(\rho^v_{33} - 1) + b_2\rho^c_{11} & 2(b_5 - b_4)\rho^v_{23} + b_1\rho^c_{11} \\ -b_1\overline{\rho^{cv}_{12}} - b_3\overline{\rho^{cv}_{13}} & 2(b_5 - b_4)\overline{\rho^v_{23}} + b_1\rho^c_{11} & 2(b_4 - b_5)(\rho^v_{22} - 1) + b_3\rho^c_{11} \end{pmatrix}.$$

Classification des matrices de densité pour un système à trois niveaux d'énergie

Nous résumons dans cette partie la méthode de classification effectuée dans [GSS16] pour obtenir une matrice de densité pour un système à trois niveaux qui vérifie les propriétés physiques (hermitienne, semi-définie positive et de trace un).

Dans le cas d'un système à trois niveaux, on utilise les matrices de *Gell-Mann* [HE81] notées λ_i, $i = 1,...,8$ qui remplacent les matrices de Pauli σ_i, $i = 1,2,3$ utilisées dans le cas d'un système à deux niveaux. On écrit

$$\rho(x) = \frac{1}{3}(I + \sqrt{3}x.\lambda) = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} + \frac{x_3}{\sqrt{3}} + \frac{x_8}{3} & \frac{x_1 - ix_2}{\sqrt{3}} & \frac{x_4 - ix_5}{\sqrt{3}} \\ \frac{x_1 + ix_2}{\sqrt{3}} & \frac{1}{3} - \frac{x_3}{\sqrt{3}} + \frac{x_8}{3} & \frac{x_6 - ix_7}{\sqrt{3}} \\ \frac{x_4 + ix_5}{\sqrt{3}} & \frac{x_6 + ix_7}{\sqrt{3}} & \frac{1}{3} - \frac{2x_8}{3} \end{pmatrix}, \qquad (2)$$

où $x = (x_1,...,x_8) \in \mathbb{R}^8$ et $\lambda = (\lambda_1,...,\lambda_8)$ est la forme vectorielle des matrices de *Gell-Mann* λ_i et on note $x.\lambda = \sum_{i=1}^{8} x_i\lambda_i$ avec

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

La matrice ρ ainsi exprimée est hermitienne et de trace égale à un.

Le problème concernant le choix du vecteur $x \in \mathbb{R}^8$ tel que la matrice $\rho(x)$ soit semi-définie positive est étudié dans [GSS16] et on a le théorème suivant :

Théorème 1.1.2. [*GSS16*] *Si* $\rho(x) = \frac{1}{3}(I + \sqrt{3}x.\lambda)$ *et* $det(\rho(x)) = 0$ *pour tout* x *tel que* $\|x\| \leq 1$ *alors* $\rho(x)$ *est semi-définie positive.*

Par un simple calcul on trouve que

$det(\rho(x)) = \frac{1}{27}[3 \parallel x \parallel^2 -6x_8(x_1^2+x_2^2+x_3^2-\frac{1}{2}(x_4^2+x_5^2+x_6^2+x_7^2)-\frac{x_8^2}{3})-6\sqrt{3}(x_1x_4x_6+x_1x_5x_7+x_2x_5x_6-x_2x_4x_7) -3\sqrt{3}x_3(x_4^2+x_5^2-x_6^2-x_7^2)-1]$.

La condition $det(\rho(x)) = 0$ donne les vecteurs $x \in \mathbb{R}^8$ et les équations des formes géométriques correspondantes aux matrices de densité semi-définies positives engendrées par les triplets $(\lambda_j, \lambda_k, \lambda_l)$, dans la proposition suivante que nous utiliserons pour la suite.

Proposition 1.1.3. [*GSS16*]

1) *Pour* $x = (x_1, x_2, 0, 0, 0, 0, 0, x_8) \in \mathbb{R}^8$ *on obtient l'équation*
$det(\rho(x)) = ((x_8+1)^2 - 3(x_1^2+x_2^2))(2x_8-1) = 0$, *qui correspond à un cône de sommet* $(x_1, x_2, x_8) = (0, 0, -1)$, *tronqué par le plan* $x_8 = \frac{1}{2}$.

2) *Pour* $x = (0, 0, x_3, x_4, x_5, 0, 0, 0) \in \mathbb{R}^8$ *on obtient l'équation*
$det(\rho(x)) = (1-\sqrt{3}x_3)(3(x_4^2+x_5^2) - (\sqrt{3}x_3+1)) = 0$, *qui correspond au paraboloïde* $3(x_4^2+x_5^2) = \sqrt{3}x_3+1$, *tronqué par le plan* $x_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

3) *Pour* $x = (0, 0, 0, x_4, 0, x_6, 0, x_8) \in \mathbb{R}^8$ *on obtient l'équation*
$det(\rho(x)) = (1+x_8)(3(x_4^2+x_6^2) + 2(x_8+\frac{1}{4})^2 - \frac{9}{8}) = 0$, *qui correspond à un ellipsoïde de revolution ayant pour semi axe principal* $\frac{3}{4}$ *et de semi axe mineur* $\sqrt{\frac{3}{8}}$, *le centre de l'ellipsoïde est le point* $(0, 0, -\frac{1}{4})$.

4) *Pour* $x = (x_1, 0, 0, x_4, 0, x_6, 0, 0) \in \mathbb{R}^8$ *on obtient le tétraèdre obèse donné par l'équation*
$det(\rho(x)) = 3(x_1^2+x_4^2+x_6^2) - 6\sqrt{3}x_1x_4x_6 = 0$.

Dans la remarque suivante on précise l'ensemble où évolue les états purs des différents cas énumérés dans la proposition précédente.

On vérifie par un simple calcul que $trace(\rho^2) = \frac{1}{3}(1+2\|x\|^2)$ en utilisant l'expression (2) de $\rho(x)$. Rappelons que les états purs et mixtes satisfont $\|x\| \leq 1$, car pour $\|x\| = 1$ on voit que la condition $trace(\rho^2) = 1$ est bien vérifiée et correspond aux états purs. Pour $\|x\| < 1$ on a $trace(\rho^2) < 1$ correspondant aux états mixtes.

Remarque 1.1.4. 1) Pour le cas du cône, le point $(x_1, x_2, x_8) = (0,0,-1)$ et le cercle $x_1^2 + x_2^2 = \frac{3}{4}$ avec $x_8 = \frac{1}{2}$ constituent l'ensemble des états purs.

2) Pour le cas du paraboloïde, les états purs se trouvent sur le cercle $x_4^2 + x_5^2 = \frac{2}{3}$ avec $x_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

3) Pour le cas de l'ellipsoïde, il existe un seul état pur donné par le point $(0,0,-1)$.

4) Pour le cas du tétraèdre obèse, on a quatre états purs qui sont des points $\frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)$, $\frac{1}{\sqrt{3}}(1,-1,-1)$, $\frac{1}{\sqrt{3}}(-1,1,-1)$ et $\frac{1}{\sqrt{3}}(-1,-1,1)$.

Pseudo-matrice de densité

Dans le cas d'un système quantique à deux niveaux d'énergie, la matrice de densité qui est semi-définie positive est bien en bijection avec le vecteur de Bloch résidant sur ou à l'intérieur de la sphère unité S^2 de telle sorte que la condition sur les états purs ($trace(\rho^2) = 1$) est vérifiée sur S^2. La proposition 1.1.3 donne différentes géométries associées à chaque vecteur de Bloch. On présente ici une matrice de densité d'un système à trois niveaux qui est hermitienne, semi-définie positive, de trace un et en bijection avec un vecteur de Bloch. Mais la condition disant que la matrice de densité est semi-définie positive est uniquement déterminer par le vecteur de Bloch résidant sur ou à l'intérieur de la sphère de rayon $\frac{2}{3}$. Ainsi comme on le verra la condition sur les états purs ($trace(\rho^2) = 1$) ne sera pas vérifiée pour la norme au carrée du vecteur de Bloch. Ce vecteur correspond donc à de faux états purs. On dit que cette matrice de densité représente des pseudo-états quantiques d'un système à deux niveaux (voir, [KKL16] pour plus de détails). La matrice de

densité est de la forme

$$\rho(x) = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{ix_1}{2} & \frac{ix_2}{2} \\ \frac{ix_1}{2} & \frac{1}{3} & -\frac{ix_3}{2} \\ -\frac{ix_2}{2} & \frac{ix_3}{2} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

Le lemme suivant permet de répondre à la question de semi-définie positivité de la matrice ρ.

Lemme 1.1.5. [*KZ06*] *La matrice de densité* ρ *est semi-définie positive si et seulement si dans le polynôme caractéristique* $det(\lambda I_3 - \rho) = \lambda^3 - a_2\lambda^2 + a_1\lambda - a_0$, *on a pour tout* $i \in \{0,1,2\}$, $a_i \geq 0$.

On trouve $det(\lambda I_3 - \rho) = \lambda^3 - \lambda^2 + (\frac{1}{9} - \frac{1}{4}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2))\lambda + \frac{1}{12}((x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) - \frac{1}{27}$.

Donc $a_2 = 1 > 0$; $a_1 = \frac{1}{9} - \frac{1}{4}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$ et $a_0 = \frac{1}{27} - \frac{1}{12}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$. On a $a_0 = \frac{1}{3}a_1$. La matrice ρ est semi-définie positive si et seulement si $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq \frac{4}{9}$. Par conséquent, les états purs et mixtes sont uniquement déterminés par le vecteur de Bloch $(x_1, x_2, x_3)^t$ qui est sur ou à l'intérieur de la sphère de rayon $\frac{2}{3}$. Cela ressemble au cas des systèmes à deux niveaux d'énergie dont les états sont uniquement déterminés par le vecteur de Bloch $(x_1, x_2, x_3)^t$ situé sur ou à l'intérieur de la sphère unité. Sauf qu'ici on a des faux états purs car on peut vérifier que $trace(\rho^2) = (\frac{1}{3} + \frac{1}{2} \parallel x \parallel^2)$ et donc pour $\parallel x \parallel = \frac{2}{3}$, on a $trace(\rho^2) = \frac{5}{9} \neq 1$.

Modélisation d'un système quantique à trois niveaux d'énergie

Dans cette partie, on va considérer les différentes paramétrisations de la matrice de densité $\rho(x)$ correspondant aux trois cas : paraboloïde, cône et pseudo-matrice. En identifiant la matrice $\dot{\rho}(x)$ avec $\dot{\rho} = -i[H + V(\rho), \rho]$ dans chaque cas on obtient un système affine avec un ou deux contrôles qui évolue sur un cercle ou sur une sphère de $\mathbb{R}^3$. Notons que pour les cas de l'ellipsoïde et du tétraèdre obèse, les états purs sont représentés par un nombre fini de points.

- **Cas paraboloïde** :

On utilise l'assertion 2 de la proposition 1.1.3 et on note pour simplifier le vecteur

$x = (0,0,x_3,x_4,x_5,0,0,0)\mathbb{R}^8$ par $x = (x_1,x_2,x_3) \in \mathrm{R}^3$ (avec $x_4 = x_1$, $x_5 = x_2$ et $x_3 = x_3$). La matrice $\rho(x)$ donnée par (2) s'écrit de la façon suivante

$$\rho(x) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1+\sqrt{3}x_3 & 0 & \sqrt{3}(x_1 - ix_2) \\ 0 & 1-\sqrt{3}x_3 & 0 \\ \sqrt{3}(x_1+ix_2) & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Les coefficients de la matrice ρ s'expriment en fonction des variables du vecteur x de la façon suivante $x_1 = \frac{\sqrt{3}(\rho_{13}^{cv}+\overline{\rho_{13}^{cv}})}{2}$, $x_2 = \frac{Im(\sqrt{3}(\overline{\rho_{13}^{cv}}-\rho_{13}^{cv}))}{2}$ et $x_3 = \frac{3(\rho_{11}^{c}+\rho_{33}^{v})}{\sqrt{3}} - \frac{2}{\sqrt{3}}$.
Pour la matrice d'interaction de Coulomb associée à cette matrice densité par un simple calcul et en utilisant l'expression de la matrice $V(\rho)$ avec les notations b_i, $1 \leq i \leq 5$, pour les paramètres de Coulomb, donnée précédemment, on trouve

$V(\rho) =$

$$\frac{1}{3}\begin{pmatrix} -b_2(2+\sqrt{3}x_3) - 2b_3 & -b_1\sqrt{3}(x_1 - ix_2) & -b_3\sqrt{3}(x_1 - ix_2) \\ -b_1\sqrt{3}(x_1+ix_2) & -4(b_4-b_5) + b_2(1+\sqrt{3}x_3) & b_1(1+\sqrt{3}x_3) \\ -b_3\sqrt{3}(x_1+ix_2) & b_1(1+\sqrt{3}x_3) & -2(b_4-b_5)(2+\sqrt{3}x_3) + b_3(1+\sqrt{3}x_3) \end{pmatrix}.$$

On considère un champ laser qui couple le premier et le troisième niveau d'énergie, ainsi l'hamiltonien correspondant est

$$H = \begin{pmatrix} E_1^c & 0 & \omega_1 + i\omega_2 \\ 0 & E_2^v & 0 \\ \omega_1 - i\omega_2 & 0 & E_3^v \end{pmatrix}, \text{ avec } |\omega_i| \leqslant M \text{ pour } i \in \{1,2\}.$$

On identifie les matrices $\dot{\rho}(x)$ et $-i[H + V(\rho), \rho]$. On calcule le crochet de matrices $[H + V(\rho), \rho]$ que l'on note (A_{ij}) pour simplifier avec $1 \leq i, j \leq 3$, et on trouve que :

$A_{11} = \overline{A_{33}} = i\frac{2\sqrt{3}}{3}(\omega_1 x_2 + x_1\omega_2)$, $A_{22} = 0$ et $A_{12} = \alpha_1 + i\beta_1$ avec

$\alpha_1 = \frac{b_1}{3\sqrt{3}}(-x_1 + \sqrt{3}x_1x_3)$ et $\beta_1 = \frac{b_1}{3\sqrt{3}}(x_2 - \sqrt{3}x_2x_3)$, et on a

$A_{12} = -\overline{A_{21}}$. Et $A_{13} = \alpha_2 + i\beta_2$ avec

$\alpha_2 = \frac{1}{3\sqrt{3}}(3(E_1^c - E_3^v) + 2(2(b_4-b_5) - (b_2+b_3)))x_1 + \frac{1}{3}(-b_2 + 2(b_4-b_5))x_1x_3 - \frac{\sqrt{3}}{3}x_3\omega_1$

$\beta_2 = \frac{1}{3\sqrt{3}}(3(E_3^v - E_1^c) - 2(2(b_4-b_5) + (b_2+b_3)))x_2 + \frac{1}{3}(b_2 + 2(b_5-b_4))x_2x_3 - \frac{\sqrt{3}}{3}x_3\omega_2$,

et on a $A_{13} = -\overline{A_{31}}$. Ensuite $A_{23} = -A_{32} = \frac{b_1}{3}x_3^2 + \frac{b_1\sqrt{3}}{9}x_3 - \frac{b_1}{3}(x_1^2 + x_2^2)$.

On obtient le système d'équations différentielles ci-dessous et les contraintes associées :

$$\begin{cases} \dot{x_1} = ((\mathrm{E}_3^{\nu} - \mathrm{E}_1^{c}) + \frac{4}{3}(b_5 - b_4) + \frac{2}{3}(b_2 + b_3)x_2 + (\frac{\sqrt{3}}{3}b_2 + \frac{2\sqrt{3}}{3}(b_5 - b_4))x_2x_3 - \omega_2 x_3 \\ \dot{x_2} = ((\mathrm{E}_1^{c} - \mathrm{E}_3^{\nu}) + \frac{4}{3}(b_4 - b_5) - \frac{2}{3}(b_2 + b_3)x_1 + (-\frac{\sqrt{3}}{3}b_2 + \frac{2\sqrt{3}}{3}(b_4 - b_5))x_1x_3 - \omega_1 x_3 \\ \dot{x_3} = 2(\omega_2 x_1 + \omega_1 x_2) = 0, \end{cases}$$

avec les conditions suivantes : $\mathrm{A}_{12} = i\dot{\rho}_{12}^{c\nu} = 0$, $\mathrm{A}_{23} = i\dot{\rho}_{23}^{\nu} = 0$ et $\mathrm{A}_{33} = i\dot{\rho}_{33}^{\nu} = 0$.
Ces conditions impliquent que :

$(i) : \omega_2 x_1 + \omega_1 x_2 = 0$

$(ii) : b_1\sqrt{3}(1 - \sqrt{3}x_3)x_1 = 0$

$(iii) : b_1\sqrt{3}(1 - \sqrt{3}x_3)x_2 = 0$

$(iv) : b_1(3x_3^2 + \sqrt{3}x_3 - 3(x_1^2 + x_2^2)) = 0.$

La condition (iv) est équivalente à $b_1(3x_3^2 + \sqrt{3}x_3 - 2) = 0$ car dans le cas du paraboloïde sur le cercle des états purs on a $x_1^2 + x_2^2 = \frac{2}{3}$ (voir Remarque 1.1.4). Les contraintes (ii) et (iii) sont vérifiées pour $x_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ car $b_1 \neq 0$. La contrainte (i) conduit à $\omega_2 = -\frac{\omega_1 x_2}{x_1}$, pour $x_1 \neq 0$. Lorsque le vecteur (x_1, x_2, x_3) représente des états purs on a $x_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Par conséquent, le système dévient

$$(\Sigma_2) : \begin{cases} \dot{x_1} = -ax_2 + \frac{\omega_1 x_2}{\sqrt{3}x_1}, \quad avec\ x_1 \neq 0\ et\ a = \mathrm{E}_1^{c} - \mathrm{E}_3^{\nu} - \mathrm{R} \\ \dot{x_2} = ax_1 - \frac{\omega_1}{\sqrt{3}}, \end{cases}$$

où $\mathrm{R} = 2(b_5 - b_4) + (b_2 + \frac{2}{3}b_3)$ et $|\ \omega_1\ | \leqslant \mathrm{M}$. On rappelle que $b_2 = \mathrm{R}_{1212}^{c-\nu}$, $b_3 = \mathrm{R}_{1313}^{c-\nu}$, $b_4 = \mathrm{R}_{2323}^{\nu} = \mathrm{R}_{3232}^{\nu}$ et $b_5 = \mathrm{R}_{3223}^{\nu} = \mathrm{R}_{2332}^{\nu}$. On a $x_1^2 + x_2^2 = \frac{2}{3}$.

- **Cas du cône** :

On utilise l'assertion 1 de la proposition 1.1.3. On note le vecteur $x = (x_1, x_2, 0, 0, 0, 0, 0, x_8)$ de $\mathbb{R}^8$ par $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^8$ (avec $x_8 = x_3$). Dans ce cas la matrice $\rho(x)$ est donnée en utilisant (2) par

$$\rho(x) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 + x_3 & \sqrt{3}(x_1 - ix_2) & 0 \\ \sqrt{3}(x_1 + ix_2) & 1 + x_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - 2x_3 \end{pmatrix}.$$

On obtient les relations suivantes :

$x_1 = \frac{\sqrt{3}(\rho_{12}^{c\nu} + \overline{\rho_{12}^{c\nu}})}{2}$, $x_2 = \frac{Im(\sqrt{3}(\overline{\rho_{12}^{c\nu}} - \rho_{12}^{c\nu}))}{2}$ et $x_3 = \frac{3(\rho_{11}^{c} + \rho_{22}^{\nu})}{2} - 1$.

Pour la matrice d'interaction de Coulomb associée à cette matrice de densité par un simple calcul et en utilisant l'expression de la matrice $\mathrm{V}(\rho)$ avec les notations b_i, $1 \leq i \leq 5$, pour les paramètres de Coulomb, donnée précédemment, on trouve

$$V(\rho) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} (b_2-2b_3)x_3-2(b_2+b_3) & -b_2\sqrt{3}(x_1-ix_2) & -b_1\sqrt{3}(x_1-ix_2) \\ -b_2\sqrt{3}(x_1+ix_2) & (4(b_5-b_4)+b_2)(x_3+1) & b_1(1+x_3) \\ -b_1\sqrt{3}(x_1+ix_2) & b_1(1+x_3) & 4(b_5-b_4)+b_3+(2(b_4-b_5)+b_3)x_3 \end{pmatrix}.$$

On considère un champs laser qui couple le premier et le deuxième niveaux. L'hamiltonien considéré est de la forme

$$H = \begin{pmatrix} E_1^c & \omega_1+i\omega_2 & 0 \\ \omega_1-i\omega_2 & E_2^v & 0 \\ 0 & 0 & E_3^v \end{pmatrix}, \text{ avec } |\omega_i| \leqslant M \text{ pour } i \in \{1,2\}.$$

Comme avant on identifie les matrices $\dot{\rho}(x)$ et $-i[H+V(\rho),\rho]$. On note le crochet $[H+V(\rho),\rho] = (A_{ij})$ avec $(1 \leq i,j \leq 3)$ et on trouve que.

$A_{11} = \overline{A_{22}} = \frac{2\sqrt{3}}{3} i(x_1\omega_2+\omega_1 x_2)$; $A_{33} = 0$ et $A_{12} = \alpha_1 + i\beta_1$ avec

$\alpha_1 = \frac{1}{3\sqrt{3}}(3(E_2^v - E_1^c)+3b_2+2(b_3+2(b_5-b_4)))x_1 + \frac{2}{3\sqrt{3}}(b_3+2(b_5-b_4))x_1x_3$ et

$\beta_1 = \frac{1}{3\sqrt{3}}(3(E_1^c - E_2^v)-3b_2-2(b_3+2(b_4-b_5)))x_2 + \frac{2}{3\sqrt{3}}(-b_3+2(b_4-b_5))x_2x_3$,

et on a $A_{12} = -\overline{A_{21}}$. $A_{13} = \alpha_2 + i\beta_2$ avec $\alpha_2 = \frac{b_1}{3\sqrt{3}}(x_1 - 2x_1x_3)$ et

$\beta_2 = \frac{b_1}{3\sqrt{3}}(-x_2+2x_2x_3)$. Et on a $A_{13} = -\overline{A_{31}}$.

$A_{23} = -A_{32} = \frac{b_1}{3}(x_3^2+x_3-(x_1^2+x_2^2))$,

et on obtient le système

$$\begin{cases} \dot{x_1} = ((E_2^v - E_1^c) + \frac{4}{3}(b_5-b_4)+b_2+\frac{2}{3}b_3)x_2 + (\frac{2b_3}{3}+\frac{4}{3}(b_5-b_4))x_2x_3 \\ \dot{x_2} = ((E_1^c - E_2^v) + \frac{4}{3}(b_4-b_5)-b_2-\frac{2}{3}b_3)x_1 + (\frac{-2}{3}b_3+\frac{4}{3}(b_4-b_5))x_1x_3 \\ \dot{x_3} = 2\sqrt{3}(\omega_2x_1+\omega_1x_2) = 0, \end{cases}$$

avec les conditions $A_{13} = i\dot{\rho}_{13}^{cv} = 0$ et $A_{23} = i\dot{\rho}_{23}^{v} = 0$.

Ces conditions impliquent que :

$(i) : (b_1 - 2b_1x_3)x_1 = 0$

$(ii) : (b_1 - 2b_1x_3)x_2 = 0$

$(iii) : b_1((x_3^2+x_3)-(x_1^2+x_2^2)) = 0.$

La condition (iii) est équivalente à $b_1(x_3^2+x_3-\frac{3}{4}) = 0$ puisque le cercle des états purs est donné par $x_1^2+x_2^2 = \frac{3}{4}$. L'égalité $\dot{x_3} = \omega_2x_1+\omega_1x_2 = 0$ implique que x_3 est une $constante$. Ensuite les conditions (i) ; (ii) et (iii) sont vérifiées pour $x_3 = \frac{1}{2}$. On obtient le système suivant dans lequel n'apparaît pas les contrôles ω_1 et ω_2.

$$\begin{cases} \dot{x_1} = -ax_2 \quad avec \quad a = \mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v - \mathrm{R} \\ \dot{x_2} = ax_1, \end{cases}$$

où R = $(2(b_5 - b_4) + b_2 + b_3)$. On ne considérera pas dans la suite un problème de contrôle optimal pour ce système. Notons que la fréquence de transition inter-bande est influencée par le paramètre de Coulomb R.

- **Cas pseudo-matrice de densité** :

On rappelle ici la pseudo-matrice de densité

$$\rho(x) = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{ix_1}{2} & \frac{ix_2}{2} \\ \frac{ix_1}{2} & \frac{1}{3} & -\frac{ix_3}{2} \\ -\frac{ix_2}{2} & \frac{ix_3}{2} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

Les coefficients de la matrice ρ s'expriment en fonction des variables du vecteur x de la façon suivante $x_1 = 2\mathrm{I}m(\overline{\rho_{12}^{cv}})$, $x_2 = 2\mathrm{I}m(\rho_{13}^{cv})$ et $x_3 = 2\mathrm{I}m(\overline{\rho_{23}^{v}})$.

La matrice d'interaction de Coulomb associée à $\rho(x)$ est donnée par:

$$\mathrm{V}(\rho) = \begin{pmatrix} -\frac{2(b_2+b_3)}{3} & \frac{i(b_2x_1 - b_1x_2)}{2} & \frac{i(b_1x_1 - b_3x_2)}{2} \\ -\frac{i(b_2x_1 - b_1x_2)}{2} & \frac{4(b_5-b_4)+b_2}{3} & i(b_4 - b_5)x_3 + \frac{b_1}{3} \\ -\frac{i(b_1x_1 - b_3x_2)}{2} & -i(b_4 - b_5)x_3 + \frac{b_1}{3} & \frac{4(b_5-b_4)+b_3}{3} \end{pmatrix}.$$

Nous considérons l'hamiltonien de la forme générale suivante

$$\mathrm{H} = \begin{pmatrix} \mathrm{E}_1^c & \omega_1 + i\omega_2 & \omega_3 + i\omega_4 \\ \omega_1 - i\omega_2 & \mathrm{E}_2^v & \omega_5 + i\omega_6 \\ \omega_3 - i\omega_4 & \omega_5 - i\omega_6 & \mathrm{E}_3^v \end{pmatrix}, \text{ avec } |\omega_i| \leqslant \mathrm{M}, \text{ pour } 1 \leq i \leq 6.$$

Comme précédemment on identifie $\dot{\rho}(x)$ et $-i[\mathrm{H} + \mathrm{V}(\rho), \rho]$, on pose $[\mathrm{H} + \mathrm{V}(\rho), \rho] = (\mathrm{A}_{ij})$ avec $1 \leq i, j \leq 3$ et on trouve que

$\mathrm{A}_{11} = i(x_1\omega_1 - x_2\omega_3)$; $\mathrm{A}_{22} = i(-x_1\omega_1 + x_3\omega_5 + \frac{b_1}{3}x_3)$; $\mathrm{A}_{33} = i(x_2\omega_3 - x_3\omega_5 - \frac{b_1}{3}x_3)$
et $\mathrm{A}_{12} = \alpha_1 + i\beta_1$ avec $\alpha_1 = \frac{1}{4}(2(b_5 - b_4) + b_3)x_2x_3 - \frac{b_1}{4}x_1x_3 - \frac{\omega_4}{2}x_3 - \frac{\omega_6}{2}x_2$ et
$\beta_1 = \frac{1}{6}(3(\mathrm{E}_2^v - \mathrm{E}_1^c) + 4(b_5 - b_4) + 3b_2 + 2b_3)x_1 - \frac{b_1}{6}x_2 + \frac{\omega_3}{2}x_3 - \frac{\omega_5}{2}x_2$.
$\mathrm{A}_{12} = -\overline{\mathrm{A}_{21}}$. $\mathrm{A}_{13} = \alpha_2 + i\beta_2$ avec $\alpha_2 = \frac{1}{4}(2(b_5 - b_4) + b_2)x_1x_3 - \frac{b_1}{4}x_2x_3 + \frac{\omega_2}{2}x_3 - \frac{\omega_6}{2}x_1$

et $\beta_2 = \frac{1}{6}(3(E_1^c - E_3^v) + 4(b_4 - b_5) - 3b_2 - 2b_3)x_2 + \frac{b_1}{6}x_1 - \frac{\omega_1}{2}x_3 + \frac{\omega_5}{2}x_1$.

Enfin $A_{13} = -\overline{A_{31}}$. $A_{23} = \alpha_3 + i\beta_3$ avec $\alpha_3 = \frac{1}{4}(b_2 - b_3)x_1x_2 + \frac{b_1}{4}(x_1^2 - x_2^2) + \frac{\omega_2}{2}x_2 + \frac{\omega_4}{2}x_1$ et $\beta_3 = \frac{1}{6}(3(E_3^v - E_2^v) + b_3 - b_2)x_3 - \frac{\omega_3}{2}x_1 + \frac{\omega_1}{2}x_2$. Et on a $A_{23} = -\overline{A_{32}}$.

On obtient alors le système suivant :

$$\begin{cases} \dot{x_1} = -\frac{b_1}{2}x_1x_3 + ((b_5 - b_4) + \frac{b_3}{2})x_2x_3 - x_2\omega_6 - x_3\omega_4 \\ \dot{x_2} = \frac{b_1}{2}x_2x_3 + ((b_4 - b_5) - \frac{b_2}{2})x_1x_3 + x_1\omega_6 - x_3\omega_2 \\ \dot{x_3} = (\frac{b_2}{2} - \frac{b_3}{2})x_1x_2 + \frac{b_1}{2}(x_1^2 - x_2^2) + x_1\omega_4 + x_2\omega_2, \end{cases}$$

avec les conditions $A_{11} = i\dot{\rho}_{11}^c = 0$; $A_{22} = i\dot{\rho}_{22}^v = 0$; $A_{33} = i\dot{\rho}_{33}^v = 0$; $Im(A_{12}) = Im(i\dot{\rho}_{12}^{cv}) = 0$; $Im(A_{13}) = Im(i\dot{\rho}_{13}^{cv}) = 0$ et $Im(A_{23}) = Im(i\dot{\rho}_{23}^v) = 0$. Ces conditions impliquent, respectivement que

(i) $\quad -x_1\omega_1 + x_2\omega_3 = 0$

(ii) $\quad x_1\omega_1 - x_3(\omega_5 + \frac{b_1}{3}) = 0$

(iii) $\quad -x_2\omega_3 + x_3(\omega_5 + \frac{b_1}{3}) = 0$

(iv) $\quad (\frac{E_1^c - E_2^v}{2} + \frac{2(b_4 - b_5)}{3} - \frac{b_2}{2} - \frac{b_3}{3})x_1 + \frac{(3\omega_5 + b_1)x_2 - 3x_3\omega_3}{6} = 0$

(v) $\quad (\frac{E_3^v - E_1^c}{2} + \frac{2(b_5 - b_4)}{3} + \frac{b_3}{2} + \frac{b_2}{3})x_2 + \frac{-(3\omega_5 + b_1)x_1 + 3x_3\omega_1}{6} = 0$

(vi) $\quad (\frac{E_2^v - E_3^v}{2} - \frac{b_3}{6} + \frac{b_2}{6})x_3 + \frac{-x_2\omega_1 + x_1\omega_3}{2} = 0.$

Il est clair que la somme de (ii) et (iii) donne (i). On a considéré H avec 6 fonctions de contrôles ω_i, $1 \leq i \leq 6$. On peut choisir $\omega_1 = \omega_3 = 0$ et $\omega_5 = -\frac{b_1}{3}$ ce qui donne (i), (ii) et (iii). Les autres conditions (iv), (v), (vi) donnent respectivement pour $(x_1, x_2) \neq (0,0)$ que les énergies libres E_1^c, E_2^v et E_3^v vérifient dans (iv) et (v) que $b_4 - b_5 = \frac{3(E_2^v - E_1^c)}{4} + \frac{3b_2}{4} + \frac{b_3}{2} = \frac{3(E_3^v - E_1^c)}{4} + \frac{3b_3}{4} + \frac{b_2}{2}$ pour b_2 et b_3 donnés. Ce qui implique $b_3 - b_2 = 3(E_2^v - E_3^v)$.

On remplace les différentes expressions dans le système de départ et on obtient le système suivant :

$$\begin{cases} \dot{x_1} = (\frac{3}{4}(E_1^c - E_2^v) - \frac{3}{4}b_2)x_2x_3 - \frac{b_1}{2}x_1x_3 - x_2\omega_6 - x_3\omega_4 \\ \dot{x_2} = (\frac{3}{4}(E_3^v - E_1^c) + \frac{3}{4}b_3)x_1x_3 + \frac{b_1}{2}x_2x_3 + x_1\omega_6 - x_3\omega_2 \\ \dot{x_3} = \frac{3}{2}(E_3^v - E_2^v)x_1x_2 + \frac{b_1}{2}(x_1^2 - x_2^2) + x_1\omega_4 + x_2\omega_2. \end{cases}$$

Remarque 1.1.6. Si on considère un hamiltonien $H_0 = diag(E_1^c, E_2^v, E_3^v)$ tel que $E_2^v - E_3^v = \frac{1}{3}(b_3 - b_2)$ alors ce système évolue sur la sphère de rayon $\frac{2}{3}$. En effet, on a,

$x_1\dot{x}_1 + x_2\dot{x}_2 + x_3\dot{x}_3 = (\frac{9}{4}(\mathrm{E}_3^v - \mathrm{E}_2^v) + \frac{3}{4}(b_3 - b_2))x_1x_2x_3 = 0$. Par conséquent, $\|x(t)\|^2 = \|x(0)\|^2$ et si $\|x(0)\| = \frac{2}{3}$ alors $x(t)$ est sur la sphère de rayon $\frac{2}{3}$.

On obtient dans ce cas un système affine (avec $\omega_5 = -\frac{b_1}{3}$) de la forme

$$\dot{x} = \mathrm{F}(x) + \omega_2\mathrm{G}_2(x) + \omega_4\mathrm{G}_4(x) + \omega_6\mathrm{G}_6(x).$$

On vérifie que $det(\mathrm{G}_2(x), \mathrm{G}_4(x), \mathrm{G}_6(x)) = 0$. On peut alors choisir $\omega_6 = 0$. Le système devient en posant $a_1 = \frac{3}{4}(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v - b_2)$, $a_2 = \frac{3}{4}(\mathrm{E}_3^v - \mathrm{E}_1^c + b_3)$ et $a_3 = \frac{3}{2}(\mathrm{E}_3^v - \mathrm{E}_2^v)$

$$(\Sigma_3) : \begin{cases} \dot{x}_1 = a_1x_2x_3 - \frac{b_1}{2}x_1x_3 - x_3\omega_4 \\ \dot{x}_2 = a_2x_1x_3 + \frac{b_1}{2}x_2x_3 - x_3\omega_2 \\ \dot{x}_3 = a_3x_1x_2 + \frac{b_1}{2}(x_1^2 - x_2^2) + x_1\omega_4 + x_2\omega_2, \end{cases}$$

avec $a_1 + a_2 + a_3 = 0$. Rappelons que $b_1 = \mathrm{R}^{c-v}_{1213}$, $b_2 = \mathrm{R}^{c-v}_{1212}$ et $b_3 = \mathrm{R}^{c-v}_{1313}$ représentent les interactions de Coulomb entre les niveaux. Et les énergies libres vérifient
$\mathrm{E}_3^v = \frac{1}{3}(b_2 - b_3) + \mathrm{E}_2^v$.

Dans ce cas l'hamiltonien est de la forme (avec $\omega_5 = -\frac{b_1}{3}$ et $\omega_1 = \omega_3 = \omega_6 = 0$) :

$$\mathrm{H} = \begin{pmatrix} \mathrm{E}_1^c & i\omega_2 & i\omega_4 \\ -i\omega_2 & \mathrm{E}_2^v & \omega_5 \\ -i\omega_4 & \omega_5 & \mathrm{E}_3^v \end{pmatrix}.$$

Remarque 1.1.7. On a : $a_1 = \frac{3}{4}(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v - b_2)$, $a_2 = \frac{3}{4}(\mathrm{E}_3^v - \mathrm{E}_1^c + b_3)$ et $a_3 = \frac{3}{2}(\mathrm{E}_3^v - \mathrm{E}_2^v)$. On remarque que la fréquence de transition intra-bande $\mathrm{E}_3^v - \mathrm{E}_2^v$ n'est pas influencée pas un paramètre d'interaction de Coulomb par conséquent le paramètre a_3 ne subit pas l'action d'un paramètre de Coulomb dans la dynamique ci-dessus. Par contre les fréquences de transition $\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v$ et $\mathrm{E}_3^v - \mathrm{E}_1^c$ sont influencées par les paramètres b_2 et b_3 respectivement.

1.1.4 Modèle à quatre niveaux d'énergie.

Dans cette partie on considère l'évolution d'une boîte quantique à quatre niveaux d'énergie décrite par les transitions entre le niveau 1 dans la bande de conduction et le niveau 2 dans la bande de valence et les transitions entre le niveau 2 dans la bande de conduction et le niveau 1 dans la bande de valence.

Par conséquent les matrices ρ et $\mathrm{V}(\rho)$ ont la forme suivante par bloc :

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11}^{c} & \rho_{12}^{cv} & 0 & 0 \\ \rho_{21}^{vc} & \rho_{22}^{v} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{22}^{c} & \rho_{21}^{cv} \\ 0 & 0 & \rho_{12}^{vc} & \rho_{11}^{v} \end{pmatrix} \text{ et } V(\rho) = \begin{pmatrix} V_{11}^{c} & V_{12}^{cv} & 0 & 0 \\ V_{21}^{vc} & V_{22}^{v} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_{22}^{c} & V_{21}^{cv} \\ 0 & 0 & V_{12}^{vc} & V_{11}^{v} \end{pmatrix},$$

avec, en utilisant (1)

$$\begin{cases} V_{11}^{c} = 2(R_{1212}^{c} - R_{1221}^{c})\rho_{22}^{c} + R_{1111}^{c-v}(\rho_{11}^{v} - 1) + R_{1212}^{c-v}(\rho_{22}^{v} - 1) \\ V_{22}^{v} = 2(R_{2121}^{v} - R_{2112}^{v})(\rho_{11}^{v} - 1) + R_{1212}^{c-v}\rho_{11}^{c} + R_{2222}^{c-v}\rho_{22}^{c} \\ V_{12}^{cv} = -R_{1122}^{c-v}\rho_{21}^{cv} - R_{1212}^{c-v}\rho_{12}^{cv} \\ V_{22}^{c} = 2(R_{2121}^{c} - R_{2112}^{c})\rho_{11}^{c} + R_{2121}^{c-v}(\rho_{11}^{v} - 1) + R_{2222}^{c-v}(\rho_{22}^{v} - 1) \\ V_{11}^{v} = 2(R_{1212}^{v} - R_{1221}^{v})(\rho_{22}^{v} - 1) + R_{1111}^{c-v}\rho_{11}^{c} + R_{2121}^{c-v}\rho_{22}^{c} \\ V_{21}^{cv} = -R_{2121}^{c-v}\rho_{21}^{cv} - R_{2211}^{c-v}\rho_{12}^{cv}. \end{cases}$$

$V_{21}^{vc} = \overline{V_{12}^{cv}}$ et $V_{12}^{vc} = \overline{V_{21}^{cv}}$.

Les paramètres de Coulomb sont tous des réels car on sait que R_{mnmn}^{b} pour $b \in \{c, v\}$ et R_{mnmn}^{c-v} sont réels et puisque les matrices ρ et $V(\rho)$ sont hermitiennes, les coefficients de leurs diagonales sont réels. La *proposition 1.1.1* donne les relations suivantes :

$R_{1212}^{c} = R_{2121}^{c}$, $R_{1221}^{c} = R_{2112}^{c}$, $R_{1212}^{c-v} = R_{2121}^{c-v}$, $R_{2211}^{c-v} = R_{1122}^{c-v}$, $R_{1212}^{v} = R_{2121}^{v}$ et $R_{1221}^{v} = R_{2112}^{v}$.

Pour simplifier les notations on posera dans la suite

$$R_0 = R_{1212}^{c} = R_{2121}^{c} \ , \ R_0^{'} = R_{1212}^{v} = R_{2121}^{v} \ , \ R_1 = R_{1221}^{c} = R_{2112}^{c} \ , \ R_1^{'} = R_{1221}^{v} = R_{2112}^{v} \ ,$$
$$R_2 = R_{1111}^{c-v} \ , \ R_3 = R_{1212}^{c-v} = R_{2121}^{c-v} \ , \ R_4 = R_{2222}^{c-v} \ et \ R_5 = R_{2211}^{c-v} = R_{1122}^{c-v}.$$

Modélisation d'un système quantique à quatre niveaux d'énergie.

On considère une matrice de densité par bloc de deux matrices à deux niveaux

$$\rho(x, y) = \begin{pmatrix} \rho(x) & 0 \\ 0 & \rho(y) \end{pmatrix},$$

où x et y les deux vecteurs de Bloch $x = (x_1, x_2, x_3)^t$ et $y = (x_4, x_5, x_6)^t$, avec

$$\rho(x) = \begin{pmatrix} \frac{1+x_3}{4} & \frac{x_1 - ix_2}{4} \\ \frac{x_1 + ix_2}{4} & \frac{1-x_3}{4} \end{pmatrix} \text{ et } \rho(y) = \begin{pmatrix} \frac{1+x_6}{4} & \frac{x_4 - ix_5}{4} \\ \frac{x_4 + ix_5}{4} & \frac{1-x_6}{4} \end{pmatrix}.$$

Pour la matrice d'interaction de Coulomb $V(\rho)$ associée on calcule ses coefficients en utilisant les notations précédentes des paramètres de Coulomb et on trouve

$$\begin{cases} V_{11}^{c} = \frac{1}{2}(R_0 - R_1) - \frac{3}{4}(R_2 + R_3) - \frac{R_3}{4}x_3 + (\frac{1}{2}(R_0 - R_1) - \frac{R_2}{4})x_6 \\ V_{22}^{v} = \frac{3}{2}(R_1' - R_0') + \frac{1}{4}(R_3 + R_4) + \frac{R_3}{4}x_3 + (\frac{1}{2}(R_1' - R_0') + \frac{R_4}{4})x_6 \\ V_{12}^{cv} = -\frac{1}{4}(R_3 x_1 + R_5 x_4) + \frac{i}{4}(R_3 x_2 + R_5 x_5) \\ V_{22}^{c} = \frac{1}{2}(R_0 - R_1) - \frac{3}{4}(R_3 + R_4) + (\frac{1}{2}(R_0 - R_1) - \frac{R_4}{4})x_3 - \frac{R_3}{4}x_6 \\ V_{11}^{v} = \frac{3}{2}(R_1' - R_0') + \frac{1}{4}(R_3 + R_2) + (\frac{1}{2}(R_1' - R_0') + \frac{R_2}{4})x_3 + \frac{R_3}{4}x_6 \\ V_{21}^{cv} = -\frac{1}{4}(R_3 x_4 + R_5 x_1) + \frac{i}{4}(R_3 x_5 + R_5 x_2). \end{cases}$$

On considère l'hamiltonien de la forme par bloc.

$$H = \begin{pmatrix} E_1^c & \omega_1(t) & 0 & 0 \\ \omega_1(t) & E_2^v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^c & \omega_2(t) \\ 0 & 0 & \omega_2(t) & E_1^v \end{pmatrix},$$

où E_1^c et E_2^v (respectivement E_2^c et E_1^v) sont les énergies libres pour la bande de conduction et la bande de valence; avec $\omega_i(t)$, $i \in \{1,2\}$ représentant les fonctions du contrôles à valeurs réelles et bornées.

On calcule le crochet $[H + V(\rho), \rho]$ et on identifie les deux matrices $\dot{\rho}(x,y)$ et $-i[H + V(\rho), \rho]$. On obtient le système (Σ_4) suivant, sans contraintes.

$$(\Sigma_4) \quad \begin{cases} \dot{x_1} = (E_2^v - E_1^c + \frac{1}{2}(3R_1' - 3R_0' + R_1 - R_0) + R_3 + \frac{1}{4}(3R_2 + R_4))x_2(t) - \frac{1}{2}R_5 x_3 x_5 + \\ (\frac{1}{2}(R_1' - R_0' - R_0 + R_1) + \frac{1}{4}(R_2 + R_4))x_2 x_6; \\ \dot{x_2} = (E_1^c - E_2^v + \frac{1}{2}(-3R_1' + 3R_0' - R_1 + R_0) - R_3 - \frac{1}{4}(3R_2 + R_4))x_1(t) + \frac{1}{2}R_5 x_3 x_4 \\ +(\frac{1}{2}(R_0' - R_1' + R_0 - R_1) - \frac{1}{4}(R_2 + R_4))x_1 x_6 - 2\omega_1(t)x_3; \\ \dot{x_3} = \frac{1}{2}R_5 x_1 x_5 - \frac{1}{2}R_5 x_2 x_4 + 2\omega_1(t)x_2 \\ \dot{x_4} = (E_1^v - E_2^c + \frac{1}{2}(3R_1' - 3R_0' + R_1 - R_0) + R_3 + \frac{1}{4}(R_2 + 3R_4))x_5(t) - \frac{1}{2}R_5 x_2 x_6 \\ +(\frac{1}{2}(R_1' - R_0' - R_0 + R_1) + \frac{1}{4}(R_2 + R_4))x_3 x_5; \\ \dot{x_5} = (E_2^c - E_1^v + \frac{1}{2}(-3R_1' + 3R_0' - R_1 + R_0) - R_3 - \frac{1}{4}(R_2 + 3R_4))x_4(t) + \frac{1}{2}R_5 x_1 x_6 \\ +(\frac{1}{2}(R_0' - R_1' + R_0 - R_1) - \frac{1}{4}(R_2 + R_4))x_3 x_4 - 2\omega_2(t)x_6; \\ \dot{x_6} = \frac{1}{2}R_5 x_2 x_4 - \frac{1}{2}R_5 x_1 x_5 + 2\omega_2(t)x_5. \end{cases}$$

On va mettre en évidence l'interaction entre les deux blocs de $\rho(x,y)$ dans la dynamique de ce système.
Pour simplifier les notations on pose
$a_1 = \mathrm{E}_2^{\nu} - \mathrm{E}_1^{c} - \mathrm{R}$, $a_2 = \mathrm{E}_1^{\nu} - \mathrm{E}_2^{c} - \mathrm{R}'$ avec
$\mathrm{R} = \frac{1}{2}(-3\mathrm{R}_1' + 3\mathrm{R}_0' - \mathrm{R}_1 + \mathrm{R}_0) - \mathrm{R}_3 - \frac{1}{4}(3\mathrm{R}_2 + \mathrm{R}_4)$,
$\mathrm{R}' = \frac{1}{2}(-3\mathrm{R}_1' + 3\mathrm{R}_0' - \mathrm{R}_1 + \mathrm{R}_0) - \mathrm{R}_3 - \frac{1}{4}(\mathrm{R}_2 + 3\mathrm{R}_4)$.
Et $b = \frac{1}{2}(\mathrm{R}_1' - \mathrm{R}_0' - \mathrm{R}_0 + \mathrm{R}_1) + \frac{1}{2}(\mathrm{R}_2 + \mathrm{R}_4)$, $c = \frac{1}{2}\mathrm{R}_5$.

Le système (Σ_4) s'écrit :

$$(\Sigma_4) \quad \begin{cases} \dot{x_1} = a_1 x_2 - c x_3 x_5 + b x_2 x_6, \\ \dot{x_2} = -a_1 x_1 + c x_3 x_4 - b x_1 x_6 - u_1 x_3, \\ \dot{x_3} = c(x_1 x_5 - x_2 x_4) + u_1 x_2, \\ \dot{x_4} = a_2 x_5 - c x_2 x_6 + b x_3 x_5, \\ \dot{x_5} = -a_2 x_4 + c x_1 x_6 - b x_3 x_4 - u_2 x_6, \\ \dot{x_6} = c(x_2 x_4 - x_1 x_5) + u_2 x_5 \end{cases}$$

avec $u_1(t) = 2\omega_1(t)$ et $u_2(t) = 2\omega_2(t)$ tels que $|u_i| \leq \mathrm{M}$, $i \in \{1,2\}$.
On vérifie facilement que $x_1\dot{x}_1 + x_2\dot{x}_2 + x_3\dot{x}_3 = 0$ et $x_4\dot{x}_4 + x_5\dot{x}_5 + x_6\dot{x}_6 = 0$ ce qui implique que $\sum_{j=1}^{6} x_j\dot{x}_j = 0$.

Dans la section suivante on présente des résultats de la théorie du contrôle optimal que nous allons utiliser pour étudier les systèmes (Σ_1), (Σ_2), (Σ_3) et (Σ_4) à deux, trois et quatre niveaux.

1.2 Contrôle en temps minimal

On s'intéresse à un système de contrôle affine avec m contrôles décrit par

$$(\Sigma) \quad \dot{x} = \mathrm{F}(x) + \sum_{i=1}^{m} u_i \mathrm{G}_i(x),$$

où $x \in \mathbb{R}^n$, les fonctions $\mathrm{F}, \mathrm{G}_1, ..., \mathrm{G}_m$ sont de classe C^∞ et $u = (u_1, ..., u_m)^t \in \mathscr{U} \subset \mathbb{R}^m$. Les fonctions de contrôle $u(\cdot) : [0, \mathrm{T}] \longrightarrow \mathscr{U} \subset \mathbb{R}^m$ sont mesurables bornées à valeurs dans un domaine $\mathscr{U}$ de $\mathbb{R}^m$.

Un problème de contrôle optimal consiste à trouver une trajectoire $x(\cdot)$ associée au contrôle $u(\cdot)$ solution du système (Σ) vérifiant $x(0) = x_0$ et $x(\mathrm{T}) = x_1$ et minimisant un coût fonctionnel $\mathrm{C}(u)$ défini par

$$\mathrm{C}(u) = \int_0^{\mathrm{T}} \mathrm{L}(x(t), u(t))\, dt,$$

où $\mathrm{L} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}$ est une fonction critère de classe C^1. Si $\mathrm{L}(x(t), u(t)) = 1$ sur $[0, \mathrm{T}]$, alors $\mathrm{C}(u) = \mathrm{T}$ et on a un problème de contrôle en temps minimal.

Définition 1.2.1. Le système (Σ) est dit contrôlable si pour tous $x_0, x_1 \in \mathbb{R}^n$ il existe une fonction de contrôle $u(\cdot) : [0, \mathrm{T}] \longrightarrow \mathscr{U}$, de trajectoire associée $x(\cdot)$ telle que $x(0) = x_0$ et $x(t_1) = x_1$ pour $t_1 \in [0, \mathrm{T}]$.

Le théorème suivant, détaillé dans ([Jea11] et [AS04]), donne un critère classique de contrôlabilité.

Théorème 1.2.2. [*Jea11*] *Supposons que l'enveloppe convexe de $\mathscr{U}$ contient un voisinage de l'origine dans $\mathbb{R}^m$, et que l'algèbre de Lie engendrée par les champs de vecteurs $\mathrm{F}, \mathrm{G}_1, ..., \mathrm{G}_m$ évaluée en tout point soit de dimension n et que la famille de champ de vecteurs $\left\{\mathrm{F}(x) + \sum_{i=1}^{m} u_i \mathrm{G}_i(x), u \in \mathscr{U}\right\}$ contient un champ récurrent. Alors le système (Σ) est contrôlable.*

Le théorème suivant, (voir [BP04] et [AS04]), assure l'existence d'une solution au problème de contrôle optimal. Car le théorème précédent bien qu'il permet de déterminer s'il existe une trajectoire joignant x_0 et x_1, pour tout x_0 et x_1, ne garantit pas de solution pour le problème de contrôle optimal.

Théorème 1.2.3. *Supposons que les champs de vecteurs F, G_i pour $i = 1, ..., m$ sont bornés, $\mathscr{U}$ compact et que l'ensemble $\left\{\mathrm{F}(x) + \sum_{i=1}^{m} u_i \mathrm{G}_i(x), \mathrm{L}(x, u), u \in \mathscr{U}\right\}$ est convexe. De plus, si $\mathrm{L} \geq \alpha$ où $\alpha > 0$, et s'il existe une trajectoire joignant x_0 et x_1 alors le problème de contrôle optimal admet une solution.*

On considère le problème de contrôle en temps minimal suivant :
déterminer la paire trajectoire-contrôle $(x(\cdot), u(\cdot))$ solution de (Σ) joignant $x(0) = x_0$ et $x(\mathrm{T}) = x_1$ et minimisant le coût $\mathrm{C}(u) = \mathrm{T}$. Cette paire est dite trajectoire optimale.

Remarque 1.2.4. Les systèmes que nous allons étudier satisfont les conditions des théorèmes 3.2 et 3.3. En effet, ces systèmes admettent au moins un champs récurrent. De plus, ils évoluent sur une sphère ou un cercle et donc les champs de vecteurs sont bornés. L'existence de solution du problème de contrôle en temps minimal est garantie, puisque ces systèmes dépendent linéairement de la variable de contrôle u et que l'ensemble des contrôles $\mathscr{U}$ est compact et convexe.

1.2.1 Principe de Maximum de Pontryagin

Le principe du maximum de Pontryagin (PMP) est une généralisation de la formulation hamiltonienne du calcul des variations classique. Il donne des conditions nécessaires qu'une trajectoire doit satisfaire pour minimiser un coût fonctionnel. On peut se référer à ([PBG$^+$62], [Son98], [BP04], [AS04] et [Jea11]) pour plus de détails. Pour $x \in \mathbb{R}^n$, on note $\mathrm{T}_x\mathbb{R}^n$ et $\mathrm{T}_x^*\mathbb{R}^n$ les espaces tangent et cotangent en x à $\mathbb{R}^n$ respectivement. L'hamiltonien associé au système (Σ) et au coût $\mathrm{C}(u) = \mathrm{T}$ $(\mathrm{L}(x,u) = 1)$ est défini de la manière suivante pour tout $(x, p, u) \in \mathrm{T}^*\mathbb{R}^n \times \mathscr{U}$, où p est un vecteur ligne, appelé vecteur adjoint, et p_0 une constante, $p_0 \leq 0$.

$$\mathrm{H}(x(t), p(t), u(t)) = p(t)(\mathrm{F}(x(t)) + \textstyle\sum_{i=1}^{m} u_i(t)\mathrm{G}_i(x(t))) + p_0.$$

On énonce le principe du maximum de Pontryagin pour le problème de contrôle en temps minimal associé au système (Σ) dans le cas général où la cible et la donnée initiale sont deux sous-variétés différentiables N_0 et N_1 de $\mathbb{R}^n$ et où $x(0) \in \mathrm{N}_0$ et $x(\mathrm{T}) \in \mathrm{N}_1$.

Théorème 1.2.5 (PMP)**.** *Si le couple $(x(\cdot), u(\cdot))$ est optimal, alors il existe une fonction absolument continue non nul $p(\cdot) : [0, \mathrm{T}] \longrightarrow \mathrm{T}^*_{x(t)}\mathbb{R}^n$, $t \longmapsto p(t)$, et une constante $p_0 \leqslant 0$, tel que pour presque tout $t \in [0, \mathrm{T}]$*

1) $\dot{x}(t) = \frac{\partial \mathrm{H}}{\partial p}(x(t), p(t), u(t))$ *et* $\dot{p}(t) = -\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial x}(x(t), p(t), u(t))$

2) $\mathrm{H}(x(t), p(t), u(t)) = max_{v \in \mathscr{U}} \{\mathrm{H}(x(t), p(t), v)\}$

3) $\mathrm{H}(x(t), p(t), u(t)) = 0$

4) $p(0)v = 0$, $\forall v \in T_{x(0)}N_0$ *et* $p(T)w = 0$, $\forall w \in T_{x(T)}N_1$ *(conditions de transversalité).*

Une trajectoire $x(\cdot)$ qui satisfait le (PMP) est appelée *trajectoire extrémale* et le couple $(x(\cdot), p(\cdot))$ est appelé *paire extrémale*. Si $p_0 \neq 0$, la trajectoire est une *extrémale normale*. Si $p_0 = 0$, la trajectoire est une *extrémale anormale*. Les trajectoires optimales se trouvent parmi les trajectoires extrémales.

1.2.2 Synthèse en temps minimal pour un système en dimension deux

Dans notre étude, on va s'intéresser à des systèmes affines avec deux contrôles

$$\dot{x} = F(x) + u_1 G_1(x) + u_2 G_2(x),$$

avec $|u_i| \leq M$, pour $i \in \{1,2\}$ et $x \in Q$, où Q est une variété de dimension 2, $Q \subset \mathbb{R}^3$. Et le coût à minimiser est $C(u) = \int_0^T 1\,dt = T$,
L'hamiltonien associé est :

$$H(x(t), p(t), u(t)) = p(t)(F(x(t)) + u_1(t)G_1(x(t)) + u_2(t)G_2(x(t))) + p_0.$$

La condition de maximisation du (PMP) s'écrit

$$max_{|v_i| \leq M} H(x(t), p(t), v) = max_{|v_i| \leq M} \sum_{i=1}^{2} v_i \Phi_i(t)$$

où les fonctions

$$\Phi_i(t) = p(t)G_i(x(t)) \qquad pour \quad i \in \{1,2\}$$

sont appelées les fonctions de commutation. L'analyse de ces fonctions Φ_i permet de donner les contrôles extrémaux maximisant l'hamiltonien $H(x(t), p(t), v)$.

On présente les notions nécessaires à la résolution d'un problème de contrôle en temps minimal pour un système qui évolue sur une variété de dimension deux. On se limitera au cas où le système dynamique est avec un seul contrôle ($u_2 = 0$ et $u_1 = u$) pour la synthèse en temps minimal.
La résolution des problèmes de contrôle en temps minimal sur une variété de dimension 2 est développée dans [BP04] et [Pic96]. On rappelle dans cette partie les définitions et propriétés qu'on utilisera pour l'étude du modèle de Bloch à deux, trois ou quatre niveaux.
Pour le cas d'un système affine avec un seul contrôle $\dot{x} = F(x) + uG(x)$, où $x \in Q$ et $|u| \leq M$,

nous présentons premièrement une stratégie de commutation du contrôle en temps minimal et nous formulons ensuite les concepts de base pour la construction d'une synthèse en temps minimal.

La fonction de commutation associée est donnée par $\Phi(t) = p(t)\mathrm{G}(x(t))$.
Cette fonction permet d'analyser les différents comportements des contrôles qui satisfont la condition de maximisation du (PMP). En effet, le contrôle u doit être de valeur maximale (en module) pour maximiser la partie de l'hamiltonien, sur laquelle agit le contrôle, et son signe dépend du signe de la fonction de commutation Φ, de telle sorte que $u\Phi(t) > 0$. Nous donnons ici quelques propriétés de la fonction de commutation.

- Si $\Phi(t) > 0$ (resp. $\Phi(t) < 0$) pour $t \in]t_1, t_2[\subset [0, \mathrm{T}]$, alors le contrôle extrémal constant est donné par $u(t) = \mathrm{M}$, (resp. $u(t) = -\mathrm{M}$) et la trajectoire associée, solution de $\dot{x} = (\mathrm{F} + u\mathrm{G})(x)$ sur l'intervalle $]t_1, t_2[$ est une trajectoire extrémale $bang$.

- Si la fonction Φ est nulle en un point isolé avec une dérivée non nulle en ce point on obtient une trajectoire extrémale $bang - bang$ de la manière suivante: supposons que pour un certain $t \in]0, \mathrm{T}[$, on a $\Phi(t) = 0$ et $\dot{\Phi}(t)$ existe telle que $\dot{\Phi}(t) > 0$ (resp. $\dot{\Phi}(t) < 0$), alors il existe $\varepsilon > 0$ telle que $x(\cdot)$ correspond au contrôle constant $u = -\mathrm{M}$ sur $]t - \varepsilon, t[$ et $u = \mathrm{M}$ sur $]t, t + \varepsilon[$ (resp. $u = \mathrm{M}$ sur $]t - \varepsilon, t[$ et $u = -\mathrm{M}$ on $]t, t + \varepsilon[$); par conséquent la trajectoire est $bang$-$bang$, c'est une concaténation de deux trajectoires extrémales $bang$. Ce temps t auquel le contrôle u commute est appelé *temps de commutation*.

- D'autre part, si Φ est nulle sur un intervalle $\mathrm{I} = [t_1, t_2] \subset [0, \mathrm{T}]$, on dit que $x(\cdot)$ est une extrémale singulière correspondant au contrôle singulier u_s, que l'on peut obtenir en utilisant le fait que pour tout $t \in \mathrm{I} \subset [0, \mathrm{T}]$, on a

$$\dot{\Phi}(t) = p(t)[\mathrm{F}, \mathrm{G}](x(t)) = 0,$$

où $[\mathrm{F}, \mathrm{G}]$ est le crochet de Lie des champs de vecteurs F et G, défini par $[\mathrm{F}, \mathrm{G}](x) = \frac{\partial \mathrm{G}(x)}{\partial x}\mathrm{F}(x) - \frac{\partial \mathrm{F}(x)}{\partial x}\mathrm{G}(x)$, pour tout $x \in \mathbb{R}^n$.

Les différentes fonctions et ensembles introduits ici sont utiles pour l'étude des trajectoires extrémales et la localisation des trajectoires singulières pour un système
$\dot{x} = \mathrm{F}(x) + u\mathrm{G}(x)$ où $x \in \mathrm{Q} \subset \mathbb{R}^3$, Q une variété de dimension 2 et $|u| \leq \mathrm{M}$.

$$\Delta_1(x) = \mathrm{F}(x) \wedge \mathrm{G}(x) \quad et \quad \Delta_2(x) = \mathrm{G}(x) \wedge [\mathrm{F},\mathrm{G}](x),$$

où $\wedge$ désigne le produit vectoriel.

L'ensemble $\Delta_1^{-1}(0) = \{x \in \mathrm{Q}, \Delta_1(x) = 0\}$ représente le lieu des points où $\mathrm{F}(x)$ et $\mathrm{G}(x)$ sont parallèles (appelé lieu de colinéarité). L'ensemble $\Delta_1^{-1}(0)$ est utile pour l'étude des trajectoires extrémales anormales. En effet, l'hamiltonien est donné par $\mathrm{H}(x(t), p(t), u(t)) = p(t)\mathrm{F}(x(t)) + u(t)p(t)\mathrm{G}(x(t)) + p_0$. Les extrémales anormales correspondent à $p_0 = 0$. La condition 3) du (PMP) donne $\mathrm{H}(x(t), p(t), u(t)) = 0$, alors $p(t)\mathrm{F}(x(t)) = -u(t)p(t)\mathrm{G}(x(t))$. Si $\Phi(t) = p(t)\mathrm{G}(x(t)) = 0$ en un certain t alors $p(t)\mathrm{F}(x(t)) = 0$ et donc le vecteur transposé de $p(t)$ est orthogonal aux deux vecteurs $\mathrm{F}(x(t))$ et $\mathrm{G}(x(t))$, par conséquent $\mathrm{F}(x(t))$ et $\mathrm{G}(x(t))$ sont parallèles et donc $x(t) \in \Delta_1^{-1}(0)$.
Par ailleurs, si $\Phi = 0$ sur $\mathrm{I} \subset [0,\mathrm{T}]$ alors $\dot{\Phi} = 0$ sur I. Ce qui implique que le vecteur transposé de $p(t)$ est orthogonal à $[\mathrm{F},\mathrm{G}](x)$. Et donc $p(t) = 0$ sur I ce qui contredit le (PMP). On en déduit alors que les extrémales anormales sont des extrémales *bang-bang*.

L'ensemble $\Delta_2^{-1}(0) = \{x \in \mathrm{Q}, \Delta_2(x) = 0\}$ est le lieu des points où $\mathrm{G}(x)$ et $[\mathrm{F},\mathrm{G}](x)$ sont parallèles (appelée lieu de singularité) et il est utilisé pour localiser les extrémales singulières. Celles-ci sont caractérisées par le fait que $\Phi = \dot{\Phi} = 0$ sur I. Alors le vecteur transposé de $p(t)$ est orthogonal à $\mathrm{G}(x(t))$ et à $[\mathrm{F},\mathrm{G}](x(t))$ et comme il est non nul, on en déduit que $\mathrm{G}(x(t))$ et $[\mathrm{F},\mathrm{G}](x(t))$ sont parallèles, c'est à dire, $\mathrm{G}(x(t)) \wedge [\mathrm{F},\mathrm{G}](x(t)) = 0$. Donc $x(t) \in \Delta_2^{-1}(0)$.
Un contrôle associé à une extrémale singulière est appelé contrôle singulier et noté u_s. Pour déterminer u_s on utilise le fait que sur $\Delta_2^{-1}(0)$ on a $\Delta_2(x(t)) = 0$ et donc
$\frac{d\Delta_2(x(t))}{dt} = \frac{\partial \Delta_2}{\partial x}\dot{x}(t) = 0$, $\frac{\partial \Delta_2}{\partial x}\mathrm{F}(x(t)) + u(t)\frac{\partial \Delta_2}{\partial x}\mathrm{G}(x(t)) = 0$. On en déduit que

$$u(t) = -\frac{\frac{\partial \Delta_2}{\partial x}\mathrm{F}(x(t))}{\frac{\partial \Delta_2}{\partial x}\mathrm{G}(x(t))}, \quad avec \quad \frac{\partial \Delta_2}{\partial x}\mathrm{G}(x(t)) \neq 0. \tag{3}$$

Si $|u| < 1$ alors $u(t) = u_s(t)$ est dit admissible (ici on considère $\mathrm{M} = 1$).

Par ailleurs, sur l'ensemble des points $x \in \mathrm{Q}$, tels que $x \notin \Delta_1^{-1}(0) \cup \Delta_2^{-1}(0)$ il est clair que les vecteurs $\mathrm{F}(x)$, $\mathrm{G}(x)$ forment une base de $\mathrm{T}_x\mathrm{Q}$. On peut écrire alors $[\mathrm{F},\mathrm{G}](x) = f(x)\mathrm{F}(x) + g(x)\mathrm{G}(x)$, avec $f(x)$, $g(x) \in \mathbb{R}$. On obtient

$\Delta_2(x) = \mathrm{G}(x) \wedge [\mathrm{F},\mathrm{G}](x) = \mathrm{G}(x) \wedge (f(x)\mathrm{F}(x) + g(x)\mathrm{G}(x))$

$$= -f(x)\mathrm{F}(x) \wedge \mathrm{G}(x).$$

Ainsi $\Delta_2(x) = -f(x)\Delta_1(x)$ et on en déduit que $f(x) = -\frac{\Delta_2(x)}{\Delta_1(x)}$.

La proposition et les deux lemmes suivants, (voir [BP04] et [Pic96]), montrent l'intérêt de considérer les ensembles $\Delta_1^{-1}(0)$ et $\Delta_2^{-1}(0)$ pour effectuer une synthèse en temps minimal. La proposition nous donne une relation entre la fonction f et $\dot{\Phi}$ la dérivée de la fonction de commutation Φ et les temps de commutation.

Proposition 1.2.6. *1) Si une trajectoire extrémale normale $x(\cdot)$ admet un temps de commutation $\overline{t} \in]0, \mathrm{T}[$ $(\Phi(\overline{t}) = 0)$ alors on a $\dot{\Phi}(\overline{t}) = f(x(\overline{t}))$.*

2) Soit $\Pi \subset \mathrm{Q}$ un ensemble ouvert tel que $\Pi \cap (\Delta_1^{-1}(0) \cup \Delta_2^{-1}(0)) = \emptyset$. Si une trajectoire extrémale normale commute au temps $\overline{t} \in]0, \mathrm{T}[$ tel que $x(\overline{t}) \in \Pi$ et $f > 0$ (resp. $f < 0$) sur Π, alors le contrôle peut commuter au temps $\overline{t}$ de $u = -1$ à $u = +1$ (resp. de $u = +1$ à $u = -1$).

Preuve. 1) Supposons qu'une trajectoire extrémale partant d'un point initial donné est normale. Au temps de commutation $\overline{t} \in]0, \mathrm{T}[$, nous avons $\Phi(\overline{t}) = p(\overline{t})\mathrm{G}(x(\overline{t})) = 0$. Comme $p_0 \neq 0$ on peut supposer $p_0 = -1$, on en déduit alors que
$\mathrm{H}(x(\overline{t}), p(\overline{t}), u(\overline{t})) = p(\overline{t})\mathrm{F}(x(\overline{t})) - 1 = 0$ et donc $p(\overline{t})\mathrm{F}(x(\overline{t})) = 1$. D'où

$$\dot{\Phi}(\overline{t}) = p(\overline{t})[\mathrm{F}, \mathrm{G}](x(\overline{t})) = f(x(\overline{t}))p(\overline{t})\mathrm{F}(x(\overline{t})) + g(x(\overline{t}))p(\overline{t})\mathrm{G}(x(\overline{t})) = f(x(\overline{t})).$$

2) Supposons que $\overline{t}$ est un temps de commutation et $x(\cdot)$ une extrémale normale. Par conséquent, si $f(x(\overline{t})) > 0$ on a $\dot{\Phi}(\overline{t}) = f(x(\overline{t})) > 0$. Ceci implique qu'au temps de commutation $\overline{t}$, le contrôle commute de $u = -1$ à $u = +1$. Identiquement pour $f(x(\overline{t})) < 0$ le contrôle commute de $u = +1$ à $u = -1$.

On donne le lemme suivant qui est en liaison avec l'ensemble $\Delta_2^{-1}(0)$ donné précédemment et on a ensuite des propriétés permettant de caractériser une trajectoire singulière.

Lemme 1.2.7. [*BP04*] *Soit $x(\cdot)$ une trajectoire extrémale définie sur $[0, \mathrm{T}]$. Si $x(\cdot)$ est une trajectoire singulière sur $[t_1, t_2] \subset [0, \mathrm{T}]$, alors le support de la courbe $x(\cdot)$ sur $[t_1, t_2]$ est contenu dans $\Delta_2^{-1}(0)$.*

Le lieu singulier $\Delta_2^{-1}(0)$ est constitué de deux sous-ensembles sur lesquels peut se situer une trajectoire singulière. Ces sous-ensembles s'appellent $turnpike$ ou $antiturnpike$. La définition ci-dessous permet de les caractériser.

Définition 1.2.8. On dit qu'un sous ensemble Ω de $\Delta_2^{-1}(0)$ est $turnpike$ (resp. $antiturnpike$) si pour tout $x \in \Omega$ on a :

1) $\Delta_1(x) \neq 0$.

2) Les vecteurs $X^-(x) = F(x) - G(x)$, pour $u = -1$ et $X^+(x) = F(x) + G(x)$, pour $u = +1$ ne sont pas tangents à Ω et ils sont pointés dans différents côtés de Ω.

3) Il existe un petit voisinage U de x tel que $U \cap \Delta_1^{-1}(0) = \emptyset$ et $U \setminus \Delta_2^{-1}(0)$ a deux composantes U_{X^+} et U_{X^-} telles que : $f(x) > 0$ sur U_{X^+} et $f(x) < 0$ sur U_{X^-} ce lieu est dit $turnpike$. (resp. $f(x) < 0$ sur U_{X^+} et $f(x) > 0$ sur U_{X^-} ce lieu est dit $antiturnpike$).

Le lieu de singularité $turnpike$ peut être parcouru par une trajectoire extrémale singulière optimale tandis que le lieu de singularité $antiturnpike$ ne peut pas être parcouru par une extrémale singulière optimale (L$emme$ 12, p.47 [BP04]). En effet, si une extrémale $(x(\cdot), p(\cdot))$ satisfait $x(t) \in \Delta_2^{-1}(0)$, $p(t)G(x(t)) = 0$, et $\Delta_2^{-1}(0)$ est $turnpike$ dans un voisinage de $x(t)$, alors il existe $\varepsilon > 0$ et une trajectoire extrémale définie sur $[0, t+\varepsilon]$ coïncidant avec $x(\cdot)$ sur $[0, t]$ et correspondant au contrôle singulier $|u_s| < 1$ sur $[t, t+\varepsilon]$; (L$emme$ 11, p.46 [BP04]). C'est-à-dire que nous pouvons entrer dans un lieu $turnpike$ avec une trajectoire extrémale en un temps de commutation. En outre, s'il existe une trajectoire extrémale $x(\cdot)$, un temps $\overline{t}$ de commutation et deux temps t_1 et t_2 très proche de $\overline{t}$ ($t_1 < \overline{t} < t_2$) telle que $x(\cdot)$ est bang dans $[t_1, \overline{t}]$ et est un arc singulier dans $[\overline{t}, t_2]$, alors le support de la courbe $x(\cdot)$ sur $[\overline{t}, t_2]$ est contenu dans $\Delta_2^{-1}(0)$ (*Théorème* 12, p.47 [BP04]).

L'ensemble $\Delta_1^{-1}(0)$ permet de caractériser les extrémales anormales. Cela peut être énoncé sous la forme du lemme suivant

Lemme 1.2.9. [*BP04*] *Soit* $x(\cdot) : [0, T] \longrightarrow Q$ *une trajectoire extrémale et un temps* $\overline{t} \in]0, T[$ *telle que* $\Phi(\overline{t}) = 0$ *avec* $G(x(\overline{t})) \neq 0$, *alors les conditions suivantes sont équivalentes:*
1) $x(\cdot)$ *est anormale,*
2) $x(\overline{t}) \in \Delta_1^{-1}(0)$,
3) $x(t) \in \Delta_1^{-1}(0)$ *pour chaque temps* $t \in]0, T[$ *tel que* $\Phi(t) = 0$.

Une synthèse en temps minimal se fait par la construction de trajectoires extrémales bang-bang et singulières. En effet, sous certaines conditions génériques, on peut prouver

qu'il existe un nombre fini d'arcs bang et d'arcs singuliers contenus dans une trajectoire (voir [BP04] et [Pic96]). La synthèse est construite récursivement, par le nombre de commutations de trajectoires extrémales, en supprimant à chaque étape les trajectoires non optimales (voir [BP04]).
Par ailleurs, on appelle points de coupure, les points où les courbes extrémales perdent leur optimalité globale. De façon pratique, ces points peuvent être très difficiles à calculer. Ici, nous allons les indiquer dans la synthèse numérique.

1.3 Contrôle en temps minimal pour un modèle à deux niveaux d'énergie

On applique le principe de maximum Pontryagin au problème de contrôle en temps minimal associé au modèle à deux niveaux.

On considère le système affine (Σ_1) avec deux contrôles u_1 et u_2 tels que $|u_i| \leq \mathrm{M}$ pour $i \in \{1,2\}$, et $a = \mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v - \mathrm{R}$, $(a \in \mathbb{R})$.

$$(\Sigma_1) : \begin{cases} \dot{x_1}(t) = -a x_2(t) - u_2(t) x_3(t) \\ \dot{x_2}(t) = a x_1(t) - u_1(t) x_3(t) \\ \dot{x_3}(t) = u_1(t) x_2(t) + u_2(t) x_1(t). \end{cases}$$

Le système (Σ_1) est bilinéaire homogène de la forme

$$\dot{x}(t) = (\mathrm{A} + u_1(t)\mathrm{B}_1 + u_2(t)\mathrm{B}_2)x(t)$$

$$\text{avec, } \mathrm{A} = \begin{pmatrix} 0 & -a & 0 \\ a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \mathrm{B}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \mathrm{B}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

On pose $\mathrm{K}(t) = \mathrm{A} + u_1(t)\mathrm{B}_1 + u_2(t)\mathrm{B}_2$. On vérifie facilement, que pour tout paramètre réel a et pour tout contrôle $u_1(t)$ et $u_2(t)$ on a $x_1(t)\dot{x}_1(t) + x_2(t)\dot{x}_2(t) + x_3(t)\dot{x}_3(t) = 0$ et donc $x_1^2(t) + x_2^2(t) + x_3^2(t) = \|x(0)\|^2$. La solution du système (Σ_1) de condition initiale $x(0)$ avec $\|x(0)\| = 1$ est alors contenu dans la sphère S^2 de $\mathbb{R}^3$.

L'hamiltonien associé à (Σ_1) est donné par

$$\mathrm{H}(x, p, u) = p\mathrm{K}x + p_0.$$

D'après le PMP, l'équation adjoint est

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial x} = -p\mathrm{K}$$

On vérifie facilement que $\frac{d}{dt}(px) = \dot{p}x + p\dot{x} = -p\mathrm{K}x + p\mathrm{K}x = 0$ et donc pour tout $t \in [0,\mathrm{T}]$, on a $p(t)x(t) = p(0)x(0)$ une constante. Pour $x(0) = (0,0,1)^t$, on utilise la condition de transversalité pour la variété initiale N_0 qui est la sphere S^2 ceci donne $p_3(0) = 0$. On en déduit que pour tout $s \in [0,\mathrm{T}]$, $p(s)x(s) = 0$, (le vecteur transposé de $p(s)$ est orthogonal à $x(s)$). On note pour la suite $p(0) = (\lambda, \beta, 0)$.

Les fonctions de commutation sont

$$\Phi_1(t) = p(t)\mathrm{B}_1 x(t) = p_3(t)x_2(t) - p_2(t)x_3(t) \text{ et}$$
$$\Phi_2(t) = p(t)\mathrm{B}_2 x(t) = p_3(t)x_1(t) - p_1(t)x_3(t).$$

Si pour $i \in \{1,2\}$, $\Phi_i(t) > 0$ (resp. $\Phi_i(t) < 0$) alors le contrôle extrémal est $u_i = 1$ (resp. $u_i = -1$).

Proposition 1.3.1. *Pour les contrôles constants $u_i = 1$ ou $u_i = -1$, avec $i \in \{1,2\}$ et $\mathrm{K} = \mathrm{A} + u_1\mathrm{B}_1 + u_2\mathrm{B}_2$, on a*

$$x(t) = e^{t\mathrm{K}}x(0) \quad \text{et} \quad p(t) = p(0)e^{-t\mathrm{K}}.$$

Les fonctions de commutation sont

$$\Phi_1(t) = p(t)\mathrm{B}_1 x(t) = p(0)e^{-t\mathrm{K}}\mathrm{B}_1 e^{t\mathrm{K}}x(0) \text{ et } \Phi_2(t) = p(t)\mathrm{B}_2 x(t) = p(0)e^{-t\mathrm{K}}\mathrm{B}_2 e^{t\mathrm{K}}x(0).$$

Preuve. Si les contrôles u_i, $i \in \{1,2\}$ sont constants alors la matrice $\mathrm{K} = \begin{pmatrix} 0 & -a & -u_2 \\ a & 0 & -u_1 \\ u_2 & u_1 & 0 \end{pmatrix}$ est constante. La solution de $\dot{x}(t) = \mathrm{K}x(t)$ de condition initiale $x(t_0)$, est donnée par $x(t) = e^{((t-t_0)\mathrm{K})}x(t_0)$. Les valeurs propres de K sont $\{0, iw, -iw\}$, avec $w = \sqrt{a^2 + u_1^2 + u_2^2}$. On calcule la matrice $e^{t\mathrm{K}}$ en utilisant la transformée inverse de Laplace $e^{t\mathrm{K}} = \mathscr{L}^{-1}((s\mathrm{I}d - \mathrm{K})^{-1})$. On trouve

$$(s\mathrm{I}d - \mathrm{K})^{-1} = \frac{1}{s(s^2+w^2)} \begin{pmatrix} \frac{s^2+u_1^2}{s(s^2+w^2)} & \frac{-as+u_1u_2}{s(s^2+w^2)} & \frac{au_1+su_2}{s(s^2+w^2)} \\ \frac{as+u_1u_2}{s(s^2+w^2)} & \frac{s^2+u_1^2}{s(s^2+w^2)} & \frac{au_2-su_1}{s(s^2+w^2)} \\ \frac{au_1-su_2}{s(s^2+w^2)} & \frac{au_2+su_1}{s(s^2+w^2)} & \frac{s^2+a^2}{s(s^2+w^2)} \end{pmatrix}.$$

La matrice $e^{t\mathrm{K}}$ est donnée par

$$e^{t\mathrm{K}} = \begin{pmatrix} \frac{u_1^2+(a^2+u_2)cos(wt)}{w^2} & \frac{-awsin(wt)+u_1u_2(1-cos(wt))}{w^2} & \frac{au_1(1-cos(wt))+u_2wsin(wt)}{w^2} \\ \frac{awsin(wt)+u_1u_2(1-cos(wt))}{w^2} & \frac{u_2^2(1-cos(wt))+w^2cos(wt)}{w^2} & \frac{au_2(1-cos(wt))-u_1wsin(wt)}{w^2} \\ \frac{au_1(1-cos(wt))-u_2wsin(wt)}{w^2} & \frac{au_2(1-cos(wt))+u_1wsin(wt)}{w^2} & \frac{a^2+(u_1^2+u_2^2)cos(wt)}{w^2} \end{pmatrix}$$

On obtient en particulier pour le système avec un contrôle ($u_2 = 0$ et $u_1 = u$).

$$x(t) = e^{t\mathrm{K}}x(0) = \begin{pmatrix} \frac{u^2+a^2cos(wt)}{w^2} & \frac{-asin(wt)}{w} & \frac{au(1-cos(wt)))}{w^2} \\ \frac{asin(wt)}{w} & cos(wt) & \frac{-usin(wt)}{w} \\ \frac{au(1-cos(wt))}{w^2} & \frac{usin(wt)}{w} & \frac{a^2+u^2cos(wt)}{w^2} \end{pmatrix} x(0), \qquad (4)$$

avec $w = \sqrt{a^2+u^2}$.

La fonction de commutation dans ce cas est pour ($\mathrm{B}_1 = \mathrm{B}$)

$$\Phi(t) = p(t)\mathrm{B}x(t) = p(0)e^{-t\mathrm{K}}\mathrm{B}e^{t\mathrm{K}}x(0), \text{ où } \mathrm{K} = \mathrm{A} + u\mathrm{B}, \text{ (avec } u = 1 \text{ ou } u = -1).$$

Nous procédons dans la partie suivante au calcul d'un temps de commutation.

Temps de commutation. On cherche $\bar{t} \in]0, \mathrm{T}[$ tel que $\Phi(\bar{t}) = 0$. Un simple calcul donne que $\mathrm{B}e^{t\mathrm{K}}x(0) = (0, -\frac{a^2+u^2cos(wt)}{w^2}, -\frac{usin(wt)}{w})^t$, pour $x(0) = (0,0,1)^t$ et pour $p(0) = (\lambda, \beta, 0)$ on a

$p(0)e^{-t\mathrm{K}} = (\frac{\lambda(u^2+a^2cos(wt))}{w^2} - \frac{a\beta sin(wt)}{w}, \frac{a\lambda sin(wt)}{w} + \beta cos(wt), \frac{a\lambda u(1-cos(wt))}{w^2} + \frac{u\beta sin(wt)}{w})$.

Ce qui donne

$$\Phi(t) = -\frac{a\lambda sin(wt)}{w} - \frac{a^2\beta cos(wt)}{w^2} - \frac{\beta u^2}{w^2}, \quad avec \quad w = \sqrt{a^2+u^2}.$$

Pour $u^2 = 1$. On considère la trajectoire extrémale $bang - bang$ issue du point initial $x(0) = (0,0,1)^t$. On note $\bar{t}$ le temps de commutation.

- Si $\beta = 0$, $\lambda \neq 0$ alors $p(0) = (\lambda, 0, 0)$ et $\Phi(\bar{t}) = -\frac{a\lambda sin(w\bar{t})}{\sqrt{a^2+1}} = 0$.
  Et donc $\bar{t} = \frac{k\pi}{\sqrt{a^2+1}}, \quad k \in \mathbb{N}.$ (5)

- Si $\lambda = 0$, $\beta \neq 0$ alors $p(0) = (0, \beta, 0)$ et $\Phi(t) = \frac{a^2cos(w\bar{t})}{a^2+1} + \frac{1}{a^2+1} = 0$.
  Donc $\bar{t} = \frac{arcos(-\frac{1}{a^2})}{\sqrt{a^2+1}}$, avec $a^2 \geq 1$.

- Si $\lambda \neq 0$ et $\beta \neq 0$ alors $p(0) = (\lambda, \beta, 0)$ et $\Phi(\bar{t}) = -\frac{a\lambda sin(w\bar{t})}{w} - \frac{a^2\beta cos(w\bar{t})}{w^2} - \frac{\beta}{w^2} = 0$.

On déduit de cette expression que

$$a^2(\beta^2 a^2 + \lambda^2 w^2)cos^2(w\bar{t}) + 2a^2\beta^2 cos(w\bar{t}) + \beta^2 - a^2\lambda^2 w^2 = 0.$$

On pose $X = cos(w\bar{t})$, avec $|X| \leq 1$. On obtient

$$a^2(\beta^2 a^2 + \lambda^2 w^2)X^2 + 2a^2\beta^2 X + \beta^2 - a^2\lambda^2 w^2 = 0.$$

On trouve $\Delta = 4a^2\lambda^2 w^4(ca^2 - \beta^2)$, avec $c = \|p(0)\|^2 = \lambda^2 + \beta^2$.

Dans le cas où $\Delta = 0$ alors $ca^2 = \beta^2$ et comme $\lambda^2 + \beta^2 = c$, le vecteur adjoint correspondant est donc $(\pm\sqrt{c(1-a^2)}, \pm\sqrt{c}|a|, 0)$. Cela conduit ensuite à

$X = -\frac{\beta^2}{\beta^2 a^2 + \lambda^2 w^2} = -\frac{\beta^2}{ca^2 + \lambda^2} = -\frac{ca^2}{ca^2 + c - ca^2} = -a^2$. Et on obtient

$$\bar{t} = \frac{arccos(-a^2)}{w}, \quad avec \quad 0 \leq a^2 \leq 1. \tag{6}$$

Pour avoir $\Delta > 0$ on choisit $p(0)$ telle que $ca^2 > \beta^2$, (avec $c = \|p(0)\|^2 = \lambda^2 + \beta^2$). Par conséquent , on obtient

$$X = \frac{-2a^2\beta^2 + 2|a\lambda|w^2\sqrt{ca^2 - \beta^2}}{2a^2(\beta^2 a^2 + \lambda^2 w^2)} = \frac{-\beta^2 + |\frac{\lambda}{a}|w^2\sqrt{(ca^2 - \beta^2)}}{cw^2 - \beta^2} \quad \text{ou}$$

$$X = \frac{-2a^2\beta^2 - 2|a\lambda|w^2\sqrt{ca^2 - \beta^2}}{2a^2(\beta^2 a^2 + \lambda^2 w^2)} = \frac{-a^2\beta^2 - |\frac{\lambda}{a}|w^2\sqrt{(ca^2 - \beta^2)}}{cw^2 - \beta^2},$$

le temps de commutation est alors

$$\bar{t} = \frac{1}{w}arccos\left(\frac{-\beta^2 + |\frac{\lambda}{a}|w^2\sqrt{(ca^2 - \beta^2)}}{cw^2 - \beta^2}\right), \quad avec \quad |X| \leq 1 \quad \text{ou}$$

$$\bar{t} = \frac{1}{w}arccos\left(\frac{-\beta^2 - |\frac{\lambda}{a}|w^2\sqrt{(ca^2 - \beta^2)}}{cw^2 - \beta^2}\right), \quad avec \quad |X| \leq 1.$$

Rappelons que $\bar{t} > 0$.

Dans la partie suivante, on caractérise les trajectoires extrémales. La concaténation de trajectoires extrémales nous permet d'atteindre un point final en un temps minimum.

1.3.1 Synthèse en temps minimal pour un système à deux niveaux avec un contrôle

Les résultats obtenus dans cette partie ont été en partie publiés dans le Journal Montes Taurus Journal of Pure and Applied Mathematics [ZAF20] et présentés à MICOPAM 2019 : The 2nd Mediterranean International Conference of Pure & Applied Mathematics and Related Areas. Paris-France, August 28-31 2019 [EFZ19].

On considère le problème de contrôle en temps minimal dans le cas des boîtes quantiques à deux niveaux et un seul contrôle ($u_2 = 0$ et $u_1 = u$), ce qui signifie que le champ de contrôle est réel et que la dynamique de l'électron est uniquement gouvernée par le champ de contrôle réel u. Le système affine (Σ_1) est de la forme

$$(\Sigma_1) \quad \dot{x} = \mathrm{F}(x) + u\mathrm{G}(x), \text{ avec } x \in \mathrm{S}^2 \text{ et } |u| \leq \mathrm{M}.$$

L'objectif est de réaliser la synthèse en temps minimal de ce système, c'est à dire de déterminer les trajectoires extrémales menant la condition initiale $x = (0,0,1)^t$ à un point final $x(\mathrm{T}) = x_f$ en temps minimum. Les trajectoires les plus rapides (en temps optimal) sont celles qui minimisent le coût $\mathrm{C}(u) = \mathrm{T}$.
Nous étudions les changements apportés par les effets coulombiens sur la dynamique des populations en tenant compte des fréquences de transition inter-bandes des boîtes quantiques. Quelques analyses des modifications de la dynamique d'un électron dûe à la présence du paramètre de Coulomb sont données dans Figure 2. Nous présentons le rôle non trivial du paramètre de Coulomb sur la dynamique des particules. En appliquant les développements récents dans le contrôle optimal géométrique énoncés précédemment, nous réalisons une synthèse en temps minimal numérique en faisant varier le paramètre du système (Σ_1). Les synthèses en temps minimal pour les cas où le paramètre de Coulomb est plus fort (respectivement faible) que la fréquence de transition sont présentées dans Figure 3 et Figure 4, respectivement. Enfin, on présente une analyse du temps singulier et une étude comparative de temps minimum nécessaire pour le transfert de population d'un état à un autre.

On débute l'étude de cette partie par la représentation de la dynamique de l'électron tout en variant le paramètre de Coulomb R (avec $a = \mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v - \mathrm{R}$) et ensuite on donne une synthèse numérique.

Analyse de la dynamique. Nous considérons deux boîtes quantiques B_1 et B_2 correspondant à deux valeurs de fréquence de transition inter-bande différentes données respectivement dans [Ton12] et [Gri12] par $\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v = 0.287$ pour B_1 et $\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v = 0.154$ pour B_2. On choisit R plus grand que la fréquence de transition $\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v$, puis plus petit que cette valeur, à savoir $\mathrm{R} = 10(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v)$ et $\mathrm{R} = \frac{1}{10}(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v)$. Pour réaliser notre simulation, nous considérons un contrôle constant $u = -1$ et pour chaque boîte quantique, on représente la dynamique d'un électron en faisant varier le paramètre de Coulomb R. Nous analysons l'influence du paramètre $a = \mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v - \mathrm{R}$ du système (Σ_1) sur la dynamique de l'électron pour les deux boîtes quantiques.
Les deux points jaunes représentent le pôle nord et le pôle sud de la sphère de Bloch.

Nous spécifions ces deux points (Figure 2) parce que dans le processus de transfert de population du premier état au second état dans un système quantique à deux niveaux modélisé par la sphère de Bloch, le pôle nord représente l'état initial du système et est désigné par le point $(0,0,1)^t$ et l'état final est représenté par le pôle sud et est désigné par le point $(0,0,-1)^t$.

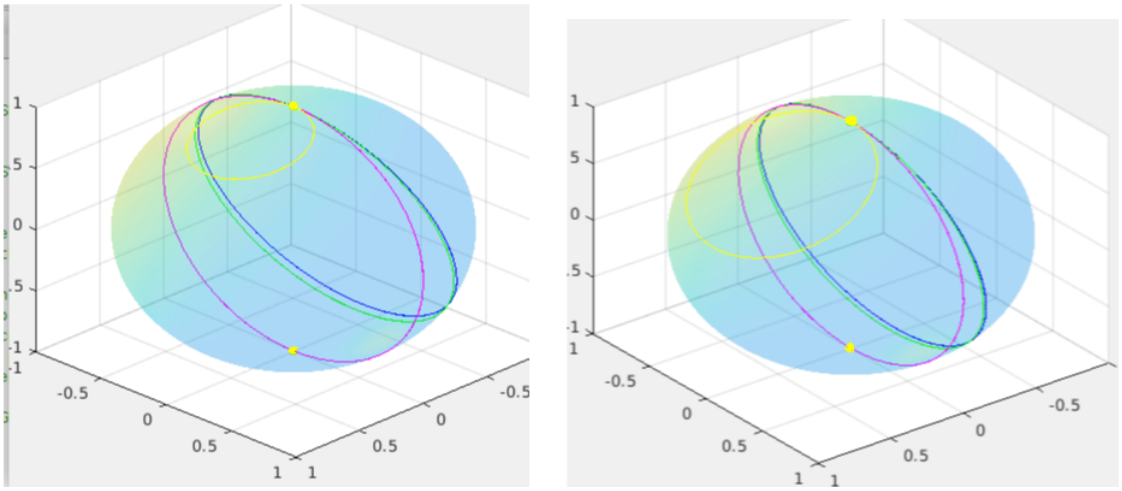

Figure 1.2: B_1 Coté gauche; B_2 coté droite. $R = 10(E_1^c - E_2^v)$ correspond à la courbe jaune, $R = \frac{1}{10}(E_1^c - E_2^v)$ la courbe verte, $R = E_1^c - E_2^v$ la courbe magenta et $R = 0$ la courbe en bleue.

Sur chaque figure, on remarque qu'il y a une grande séparation entre les courbes extrémales bleue et jaune. Ensuite la courbe jaune passe également très loin du pôle sud et reste en haut de la sphère, cela signifie donc que la trajectoire d'un électron est considérablement modifiée lorsque le paramètre de Coulomb est grandement ajouté aux fréquences de transition, il affecte grandement le transfert de population. D'autre part, la courbe de couleur magenta dévie de la courbe bleue et passe par le pôle sud cela signifie que lorsque le paramètre de Coulomb est égal aux fréquences inter-bandes, il contribue grandement au transfert de population. Et enfin, nous voyons que la courbe verte est très proche de la courbe bleue, ce qui signifie que lorsque le paramètre de Coulomb s'ajoute faiblement aux fréquences inter-bandes, il n'apporte pas de modifications significatives au système capable d'affecter un transfert de population.

Construction d'une synthèse en temps minimal. Les *propositions* suivantes présentent les résultats d'une synthèse en temps minimal numérique qui implique le paramètre de

Coulomb R pour la boîte quantique B_1. On pourra traiter de façon similaire le cas de la boîte B_2. On désigne par x^+ et x^- les trajectoires extrémales *bang* du système (Σ_1) correspondant respectivement à $u = 1$ et $u = -1$. Une trajectoire singulière est désignée par S.

Proposition 1.3.2. *Considérons le système à deux niveaux* (Σ_1) *avec* $E_1^c - E_2^v = 0.287$ *et* $R = 10(E_1^c - E_2^v) = 2,87$. *Alors : 1) une trajectoire optimale normale partant du pôle nord et atteignant un point au dessus du plan* $x_3 = 0$ *est une concaténation finie de trajectoires bang de la forme* $x^-; x^-x^+; x^-x^+x^-; x^-x^+x^-x^+$ *et* $x^-x^+x^-x^+x^-$.
2) une trajectoire optimale anormale partant du pôle nord est faite d'au plus cinq commutations et est de la forme $x^-x^+x^-x^+x^-x^+$.

Description du comportement des trajectoires.
On peut vérifier que $\Delta_1(x(t)) = ax_2(t)x(t)$ et $\Delta_2(x(t)) = -ax_3(t)x(t)$ avec $x(t) \in S^2$. Clairement, $\Delta_1^{-1}(0) = \{x_2(t) = 0\} \cap S^2$ et $\Delta_2^{-1}(0) = \{x_3(t) = 0\} \cap S^2$. On a aussi, $f(x(t)) = \frac{x_3(t)}{x_2(t)}$, où $x_2(t) \neq 0$ et $x_3(t) \neq 0$. Il est facile de donner le signe de f. Nous savons qu'une trajectoire extrémale normale solution du système de contrôle (Σ_1) peut bifurquer en un temps $\bar{t}$ de commutation possible si $\dot{\Phi}(\bar{t}) = \frac{x_3(\bar{t})}{x_2(\bar{t})}$, où $x_2(\bar{t})x_3(\bar{t}) \neq 0$.
Nous analysons le comportement des trajectoires extrémales normales dans quatre domaines en fonction du signe de $f(x) = \frac{x_3}{x_2}$, $x_2 \neq 0$ et $x_3 \neq 0$. Posons $d_1 = \{x \in S^2 : x_3 > 0; x_2 > 0\}$ et $d_2 = \{x \in S^2 : x_3 > 0; x_2 < 0\}$. En considérant les domaines d_1 (resp. d_2) on obtient les domaines d_3 (resp. d_4) en prenant $x_3 < 0$.
Pour la proposition 1.3.2, le long d'une extrémale normale *bang* quittant le pôle nord, avec le contrôle $u = -1$ qu'on note x^-, une commutation peut se produire lorsqu'elle entre dans la zone d_1 en un certain temps $\bar{t}$ de $u = -1$ à $u = +1$ parce que $\dot{\Phi}(\bar{t}) > 0$. Une trajectoire extrémale normale x^+ correspondant au contrôle $u = +1$ ne peut pas bifurquer de x^- dans d_2, parce que dans cette partie nous avons $\dot{\Phi}(\bar{t}) < 0$. Lorsque la trajectoire x^- d'auto-intersecte, elle perd son optimalité.
• La trajectoire x^+ bifurquant du point $x^-(\bar{t})$ dans d_1 peut commuter de $u = +1$ à $u = -1$ dans le domaine d_2 au temps $\overline{t_1} > \bar{t}$ parce que $\dot{\Phi}(\overline{t_1}) < 0$.
• Quand la trajectoire x^- est intersectée dans la zone d_2 par la trajectoire x^+ venant du point $x^-(\bar{t})$, elle perd son optimalité au point d'intersection appelé point de coupure.
• La trajectoire x^- venant du point $x^+(\overline{t_1})$ dans la région d_2 peut commuter de $u = -1$ à $u = +1$ dans d_1 au temps $\overline{t_2} > \overline{t_1}$ à cause de $\dot{\Phi}(\overline{t_2}) > 0$ dans ce domaine.

• La trajectoire x^+ bifurquant du point $x^-(\overline{t_2})$ dans d_1, n'est plus optimale lorsqu'elle intersecte la trajectoire x^- située en haut de la sphère de Bloch, comme indiqué sur la figure de gauche de la figure 3. Ce point d'intersection correspond à un point de coupure.
• Par ailleurs, lorsque la trajectoire x^+ n'intersecte pas la trajectoire x^- située en haut de la sphère de Bloch, elle peut commuter à un certain temps $\overline{t_3} > \overline{t_2}$ quand elle entre dans le domaine d_2 ceci est dû au fait qu'on a $\Phi(\overline{t_3}) < 0$, et la trajectoire x^- bifurquant du point $x^+(\overline{t_3})$ dans d_2 n'est plus optimale lorsqu'elle intercepte la trajectoire x^+ au point de coupure dans le même domaine.
• Il n'y a pas de trajectoire singulière. La figure de gauche de la figure 3 représente la synthèse en temps minimal pour les trajectoires extrémales normales décrites ci-dessus. Tous les points de coupure sont représentés par une couleur magenta.
• Si l'extrémale *bang* x^- commençant à partir du pôle nord avec le contrôle $u = -1$ est anormale alors la commutation peut se produire sur l'ensemble $\{x_2 = 0\} \cap S^2$ au temps approximatif ($\overline{t} = 0.36\pi$) qui est trouvé en utilisant (4) et (5). Après cinq commutations, la trajectoire perd son optimalité au point de coupure représenté en couleur magenta sur la figure à droite.

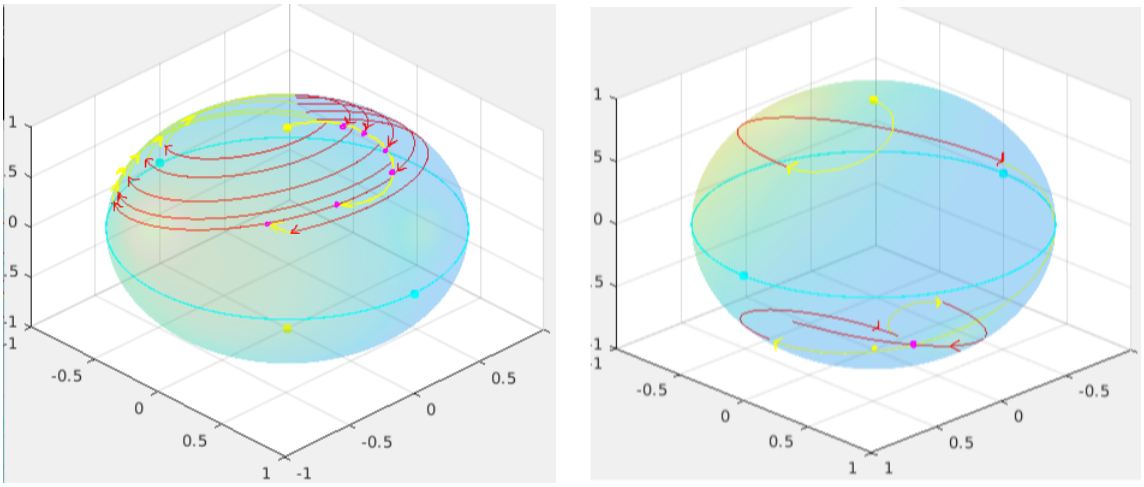

Figure 1.3: Les courbes de couleur rouge et jaune sont respectivement pour $u = +1$ et $u = -1$, la courbe cyan est le lieu singulier. Dans la figure de gauche: les trajectoires optimales normales *bang et bang-bang*. Dans la figure de droite : la trajectoire optimale anormale *bang-bang*.

La proposition précédente décrit les trajectoires optimales possibles lorsque le paramètre de Coulomb agit fortement sur la fréquence de transition. Dans la proposition suivante, nous considérons le cas où l'effet coulombien est relativement faible par rapport à la fréquence de transition.

Proposition 1.3.3. *Considérons le système à deux niveaux* (Σ_1) *avec* $\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v = 0.287$ *et* $\mathrm{R} = \frac{1}{10}(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v) = 0,0287$. *Alors : 1) une trajectoire optimale normale partant du pôle nord est une concaténation finie de trajectoires bang et de trajectoires singulières de la forme* x^-*;* $x^-\mathrm{S}$*;* $x^-\mathrm{S}x^+$*;* $x^-\mathrm{S}x^-$ *et* $x^-x^+x^-$.
2) une trajectoire optimale anormale partant du pôle nord est faite d'au plus treize commutations et est de la forme $x^-x^+...x^-x^+$.

Description du comportement des trajectoires.
Rappelons que les fonctions, $f(x(t)) = \frac{x_3(t)}{x_2(t)}$ et $\Phi(\bar{t}) = \frac{x_3(\bar{t})}{x_2(\bar{t})}$. De plus, on peut facilement vérifier que le contrôle singulier admissible est $u_s = 0$. Nous utilisons la même technique que précédemment pour décrire les trajectoires extrémales *bang*. Mais la différence est qu'ici la trajectoire x^- venant du pôle nord traverse le lieu singulier *turnpike* et le long de cette trajectoire, une commutation du contrôle peut se produire de $u = -1$ à $u = 1$ dans le domaine d_4 car $\dot{\Phi} > 0$. Par ailleurs, soit $\bar{t}$ le premier temps auquel elle atteint ce lieu singulier au point $x^-(\bar{t})$, une commutation peut se produire de $u = -1$ à $u = +1$ au point $x^-(\bar{t})$, dans un petit voisinage de $x^-(\bar{t})$ dans d_1 ou le contrôle devient singulier. La trajectoire x^+ venant du point $\bar{x}$ passe par le pôle sud, de sorte que le pôle sud est atteint par la trajectoire extrémale $bang\text{-}bang$. D'autre part, le lieu singulier peut alors contenir une trajectoire singulière et celle-ci est conduite par le contrôle singulier $u_s = 0$.
Si la trajectoire extrémale $bang$ x^- quittant le pôle nord avec le contrôle $u = -1$ est anormale, une commutation peut se produire sur $\{x_2 = 0\} \cap \mathrm{S}^2$ au temps approximatif $\bar{t} = \pi$ qui est obtenu en utilisant (4) et (5). La trajectoire x^+ issue de la treizième commutation intersecte la trajectoire x^- issue du pôle nord où elle perd son optimalité au point de coupure.

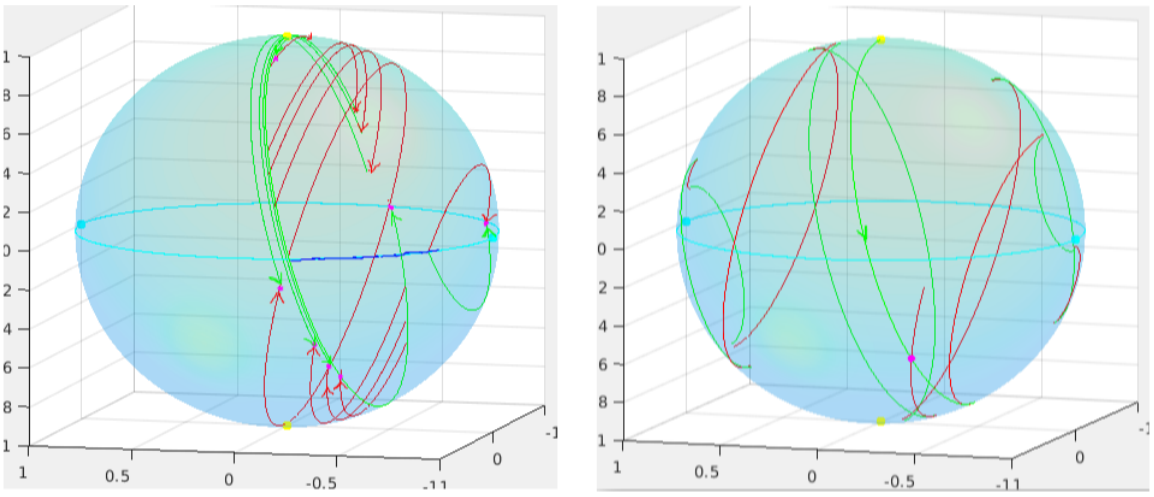

Figure 1.4: Les courbes de couleur rouge et verte sont respectivement pour $u = +1$ et $u = -1$, la courbe bleue est une trajectoire optimale singulière. La courbe en couleur cyan est un lieu singulier et les points de couleur magenta sont des points de coupure. La figure de gauche : les trajectoires optimales normales *bang-bang; bang et singulier*. La figure de droite : la trajectoire optimale anormale *bang-bang*, le point de couleur magenta est le point de coupure.

Considérons le cas restant lorsque $E_1^c - E_2^v = R$. Clairement, si $a = E_1^c - E_2^v - R = 0$, alors la trajectoire extrémale x^- venant du pôle nord est contenue dans le cercle $\{x_1 = 0\} \cap S^2$ parce que dans le système (Σ_1) on obtient $\dot{x_1} = 0$ et $x_1(0) = 0$. La technique utilisée précédemment pour la description des trajectoires extrémales sur une variété de dimension deux n'est donc plus applicable ici. Le pôle sud est atteint de manière optimale au temps $t = \pi$ par la trajectoire x^- car la trajectoire fait un demi-tour en l'atteignant. Le contrôle conduisant l'électron du pôle nord vers le sud est seulement $bang$.

Nous donnons dans ce qui suit une conclusion de l'étude numérique effectuée ci-dessus dans laquelle nous précisons ce que pourraient impliquer, d'un point de vue physique, les valeurs des paramètres conduisant aux résultats dans les propositions 1.3.2 et 1.3.3

Conclusion. Nous avons présenté dans cette partie une synthèse en temps minimal numérique, prenant en compte la perturbation du paramètre de Coulomb sur la fréquence de transition. Pour la valeur du paramètre de Coulomb supérieure à la fréquence de transition, on trouve que les trajectoires ne sont que *bang-bang*. Lorsque la valeur du paramètre de Coulomb est faible par rapport à la fréquence de transition, la synthèse en temps minimal présente des trajectoires optimales contenant une trajectoire singulière. En outre, nous

avons constaté dans ce dernier cas qu'il existe une trajectoire extrémale conduisant l'état du système du pôle nord vers le pôle sud. D'un point de vue pratique, les résultats donnés dans les *proposition 1.3.2 et proposition 1.3.3* pourraient permettre de comprendre deux points essentiels dans le cadre physique. Tout d'abord, dans la conception de champs laser résonant pour l'inversion de population dans un système quantique à deux niveaux lorsque la fréquence de transition est fortement perturbée par l'énergie de Coulomb, *i.e.* $E_1^c - E_2^v < R$, cela peut fortement perturber une inversion de population en temps minimal. Ensuite, lorsque l'énergie de Coulomb est faiblement ajoutée à la fréquence de transition telle que $E_1^c - E_2^v > R$, un transfert de population en temps minimal peut être facilement effectué. Par conséquent, l'énergie de Coulomb peut avoir un mauvais effet sur l'inversion de population ou un facteur qui contribue à l'inversion de population lorsque son influence sur la fréquence de transition est minimale.

Analyse du temps singulier et de transfert en temps minimal

Dans cette partie on fait une analyse du temps singulier et ensuite on compare le temps de transfert minimum nécessaire du système quantique à deux niveaux d'énergie étudié dans l'article [BM05] et celui du système à deux niveaux d'énergie trouvé ici. Le système à deux niveaux de l'article [BM05] évolue sur la sphère de Bloch et la dynamique d'une particule est influencée par un paramètre dépendant de l'amplitude du champs de contrôle et des niveaux d'énergie. Nous avons constaté que dans l'étude effectuée dans cet article, la fréquence de transition n'est pas perturbée par l'interaction de Coulomb (l'énergie de Coulomb). En prenant en compte le paramètre de Coulomb on peut, par comparaison des temps de transfert minimum nécessaires, comprendre l'impact que pourrait avoir le terme de Coulomb dans le processus de transfert en temps minimum pour leur modèle.

On se propose donc d'analyser dans les cas suivants $|a| > 1$ et $0 < |a| \leq 1$, le temps $\bar{t}$ auquel la trajectoire x^- partant du point initial $x(0) = (0,0,1)^t$ et correspondant au contrôle $u = -1$ atteint le lieu singulier *turnpike*

$$\Delta_2^{-1}(0) = \{x_3 = 0\} \cap S^2.$$

La valeur de a dans la proposition 1.3.2 vérifie $|a| > 1$ et celle dans la proposition 1.3.3 vérifie $0 < |a| \leq 1$. Soit $x(\bar{t}) \in \Delta_2^{-1}(0)$. Alors en considérant la solution du système de contrôle (Σ_1), $x(\bar{t}) = e^{\bar{t}K}x(0)$, on a $x_3(\bar{t}) = 0$, ce qui donne $\frac{a^2+cos(\bar{t}w)}{w^2} = 0$, et on obtient,

$\overline{t} = \frac{\pi - arccos(a^2)}{w}$, avec $|a| \leq 1$. Ce temps $\overline{t}$ correspond au point $x(\overline{t}) = (a, \sqrt{1-a^2}, 0)$ avec $|a| \leq 1$. De plus, d'après la section précédente, ce temps minimal $\overline{t}$ correspond à un instant de commutation voir (6). Par conséquent, le point $x^-(\overline{t}) = (a, \sqrt{1-a^2}, 0)$ est un point de commutation. On voit donc que pour $|a| > 1$ le temps minimal $\overline{t}$ pour atteindre le lieu singulier n'est pas défini et le point $x(\overline{t})$ n'est pas atteignable partant du pôle nord, par conséquent, la trajectoire extrémale $bang$ partant du pôle nord tel que $|a| > 1$ ne peut pas contenir de trajectoire singulière. Dans le cas où $a = \pm 1$ on a $x(\overline{t}) = (\pm 1, 0, 0)$ et il ne peut pas y avoir de trajectoire singulière parcourant le lieu singulier *turnpike* partant de ce point car $x(\overline{t}) \in \Delta_1^{-1}(0)$ (voir *la définition 1.2.8*). Par conséquent, ce point ne correspond pas à un à un point singulier. Et le temps $\overline{t}$ dans ce cas est $\overline{t} = \frac{\pi}{\sqrt{2}}$ et ne correspond pas à un temps optimal singulier. Mais il est bien un temps de commutation. On déduit donc que pour $a = \pm 1$ le temps minimum de transfert correspondant à la trajectoire partant du pôle nord $x(0) = (0, 0, 1)^t$ et commutant au point $x(\overline{t}) = (\pm 1, 0, 0)$ pour arriver au pôle sud, $(0, 0 - 1)^t$, est $\mathrm{T} = \frac{2\pi}{\sqrt{2}}$.

On veut évaluer le temps T pour atteindre le pôle sud, $(0, 0, -1)^t$, dans le cas où $0 < |a| < 1$. On considère pour cela la trajectoire x^+ issue du point $x(\overline{t})$ et correspondant à $u = +1$. On note $x^+(\mathrm{T}) = e^{(\mathrm{T}-\overline{t})(\mathrm{A}+\mathrm{B})} x^-(\overline{t})$. De cette relation, on trouve en considérant la solution du système (Σ_1) que:
$cos(w(\mathrm{T} - \overline{t})) - \frac{\sqrt{1-a^4} sin(w(\mathrm{T}-\overline{t})}{a^2} = \frac{-1}{a^2}$ et $sin(w(\mathrm{T} - \overline{t})) + \frac{\sqrt{1-a^4} cos(w(\mathrm{T}-\overline{t}))}{a^2} = 0$.
On obtient : $cos(w(\mathrm{T} - \overline{t})) = -a^2 \quad et \quad sin(w(\mathrm{T} - \overline{t})) = \sqrt{1-a^4}$. On en déduit que $tan(w(\mathrm{T} - \overline{t})) = -\frac{\sqrt{1-a^4}}{a^2}, \quad tel \quad que \quad 0 < |a| < 1$. Nous pouvons donc conclure que le temps minimal, suffisant pour atteindre le pôle sud est $\mathrm{T} = \frac{1}{\sqrt{1+a^2}}(\pi - (arccos(a^2) + arctan(\frac{\sqrt{1-a^4}}{a^2}))), \quad avec \quad 0 < |a| < 1$. Car $w\mathrm{T} = w\overline{t} + arctan(-\frac{\sqrt{1-a^4}}{a^2}) = \pi - arccos(a^2) - arctan(\frac{\sqrt{1-a^4}}{a^2})$ et on a trouvé que $w\overline{t} = \pi - arccos(a^2)$.

Par ailleurs, on peut remarquer que $\sqrt{1+a^2}\mathrm{T} = \pi - (arccos(a^2) + arctan(\frac{\sqrt{1-a^4}}{a^2}))$, ce qui entraine que $\sqrt{1+a^2}\mathrm{T} = \pi - (arccos(a^2) + arctan(\frac{\sqrt{1-a^4}}{a^2})) \leq \pi$. Par conséquent, ce temps de transfert minimum est tel que

$$\mathrm{T} \leq \frac{\pi}{\sqrt{1+a^2}}, \quad avec \quad 0 < |a| < 1.$$

On peut conclure que dans le cas où l'influence des paramètres de Coulomb sur les fréquences de transition vérifie $0 < |a| < 1$ alors le temps minimum nécessaire pour conduire le système du pôle nord au pôle sud est :

$$T = \frac{\pi}{\sqrt{1+a^2}}, \quad avec \quad 0 < |a| < 1.$$

Comparaison de temps de transfert. Dans le modèle considéré dans [BM05], le temps minimum nécessaire de transfert pour conduire leur système du pôle nord au pôle sud sur la sphère de Bloch est donné relativement à des paramètres $\alpha = arctan(\frac{M}{E})$ et $k = \frac{2E}{cos(\alpha)} = 2\sqrt{M^2+E^2}$ où M représente l'amplitude du champ de contrôle $|u(t)| \leq M$ et E représente la valeur de chaque niveau d'énergie car les niveaux sont pris tel que $E_2^v = -E_1^c = -E$. Pour $M > E$ tel que $\alpha > \frac{\pi}{4}$ la trajectoire optimale conduisant le système du pôle nord vers le pôle sud est $bang-bang$ avec au plus une commutation qui se produit au lieu singulier $\{x_3 = 0\}$ et le temps de commutation correspond à $s_A = \frac{1}{k}(\pi - arcos(cot^2(\alpha)))$ ou $s_B = \frac{1}{k}(\pi + arcos(cot^2(\alpha)))$. Ensuite, le temps minimum nécessaire de transfert de population correspondant au contrôle $bang-bang$ est donné par

$$T' = \frac{\pi}{\sqrt{M^2+E^2}}, \quad avec \quad \alpha > \frac{\pi}{4}.$$

On sait que $a = E_1^c - E_2^v - R$ et d'après l'étude effectuée dans la proposition 1.3.3, on a $E_1^c - E_2^v = 2E = -0.287$, ce qui implique que, $E = -0.1435$. Par ailleurs nous avons $M = 1$, d'où $M > E$. On va maintenant effectuer la comparaison des deux temps minimum nécessaires suivant :

$$T' = \frac{\pi}{\sqrt{1+E^2}} \quad et \quad T = \frac{\pi}{\sqrt{1+(-2E-R)^2}}.$$

• On débute la comparaison en fixant $R = 0$ alors $a = -2E = 0.287$

$$\frac{T'}{T} = \frac{\sqrt{1+4E^2}}{\sqrt{1+E^2}} > 1 \quad et \quad on \quad obtient \quad T' > T.$$

• Si l'énergie de Coulomb $R \neq 0$ alors $a = -2E - R$ donc

$\frac{T'}{T} = \frac{\sqrt{1+(-2E-R)^2}}{\sqrt{1+E^2}}$, dans ce cas on trouve :

1) Si l'énergie de Coulomb est $R = -3E$ alors $\frac{T'}{T} = 1$ et $T' = T$.

2) Si l'énergie de Coulomb est $R = -2E$ alors $\frac{T'}{T} = \frac{1}{\sqrt{1+E^2}} \leq 1$ et $T' \leq T$.

3) Si l'énergie de Coulomb est $R < -3E \Longleftrightarrow -2E - R > E$ alors

$$\frac{T'}{T} = \frac{\sqrt{1+(-2E-R)^2}}{\sqrt{1+E^2}} > 1 \quad et \quad T' > T.$$

4) Si l'énergie de Coulomb est $R > -3E \Longleftrightarrow -2E - R < E$ alors

$$\frac{T'}{T} = \frac{\sqrt{1+(-2E-R)^2}}{\sqrt{1+E^2}} < 1 \quad et \quad T' < T.$$

L'étude comparative effectuée ci-dessus nous permet de comparer le temps minimum nécessaire de transfert de population du premier état au second état sous l'influence des

termes de Coulomb. En effet, dans le modèle [BM05] la fréquence de transition est non perturbée par un paramètre de Coulomb.

- On constate qu'en absence de terme de Coulomb le temps de transfert pour le modèle considéré ici est plus rapide que dans le modèle considéré dans [BM05].
- En outre, en présence du paramètre de Coulomb le temps de transfert des deux modèles est identique lorsque l'énergie de Coulomb R est prise égale à trois fois la valeur du niveau d'énergie.
- Dans le cas où l'énergie coulombienne est deux fois égale au niveau d'énergie ou bien trois fois supérieure au niveau d'énergie, le temps de transfert pour leur modèle est plus rapide que celui du modèle considéré ici.
- Par ailleurs, quand l'énergie de Coulomb est prise trois fois inférieure au niveau d'énergie alors le temps de transfert pour leur modèle est moins rapide que celui considéré ici.

Conclusion. On peut donc conclure que si on perturbe la fréquence de transition par une interaction Coulomb pour le modèle dans [BM05] en la prenant deux fois égale au niveau d'énergie ou bien trois fois supérieure à la valeur du niveau d'énergie cela pourrait contribuer à un transfert rapide de population. Mais si le terme de Coulomb est pris trois fois inférieur au niveau d'énergie cela pourrait rendre le temps de transfert plus long et le paramètre de Coulomb aurait donc contribué à ralentir le temps de transfert de population.

1.4 Contrôle en temps minimal pour un modèle à trois niveaux d'énergie

Nous allons considérer les deux cas, paraboloïde et pseudo-matrice de densité.

1.4.1 Etude du cas paraboloïde

Nous étudions l'effet que peut avoir le paramètre de Coulomb sur un temps minimal permettant de conduire un état pur à un autre état pur (temps de transfert) par son action sur la fréquence de transition. Nous utilisons une fréquence de transition donnée dans [FFW$^+$99], ensuite nous évaluons l'impact du paramètre de Coulomb sur le temps de transfert à travers son influence sur cette fréquence de transition.
On considère le système de contrôle associé au cas du paraboloïde. Nous avons vu que pour ce cas, les états purs sont sur le cercle de rayon $\sqrt{\frac{2}{3}}$ et le système obtenu contient un contrôle. Ce système est donné par

$$(\Sigma_2) \quad \begin{cases} \dot{x}_1(t) = -ax_2(t) + \frac{u(t)x_2(t)}{\sqrt{3}x_1(t)}, \quad avec \quad x_1(t) \neq 0 \\ \dot{x}_2(t) = ax_1(t) - \frac{u(t)}{\sqrt{3}}, \end{cases}$$

avec $a = \mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_3^v - 2(b_5 - b_4) - (b_2 + \frac{2}{3}b_3)$ et $|u| \leq \mathrm{M}$. Le coût à minimiser est $\mathrm{C}(u) = \int_0^{t_f} 1\,dt = t_f$, avec ($\mathrm{T} = t_f$).

Comme $x_1^2 + x_2^2 = \frac{2}{3}$ et $x_1 \neq 0$, on a $x_2^2 \neq \frac{2}{3}$ et x appartient à deux demi-cercle. On pose $x_1 = \sqrt{\frac{2}{3}}cos(\theta)$ et $x_2 = \sqrt{\frac{2}{3}}sin(\theta)$, on a $cos(\theta) \neq 0$ et donc $\theta \neq \frac{\pi}{2} + k\pi$, $k \in \mathbb{Z}$. On a $\theta(t) = artan(\frac{x_2(t)}{x_1(t)})$, pour $\theta \in]-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[$.

On obtient le système

$$(\Sigma_2') \quad \dot{\theta}(t) = a - \frac{u(t)}{\sqrt{2}cos(\theta(t))},$$

on suppose que $\theta \in [-c, c]$ avec $c < \frac{\pi}{2}$ pour que $\frac{1}{cos(\theta)}$ soit borné sur $[-c, c]$.

On applique le principe de maximum de Pontryagin au système (Σ_2') pour déterminer le temps de transfert.

L'hamiltonien du système est

$$\mathrm{H}(\theta, u, p(\theta)) = -\frac{p(\theta)}{\sqrt{2}cos(\theta)}u(t) + p(\theta)a + p_0,$$

où $p(\theta)$ est le vecteur adjoint et $p_0 \leq 0$.
La condition de maximisation nous donne la fonction de commutation suivante

$$\Phi(\theta) = -\frac{p(\theta)}{\sqrt{2}cos(\theta)}.$$

On obtient les contrôles extrémaux

$$u(t) = +\mathrm{M} \quad si \quad \Phi(t) \geq 0 \text{ et } u(t) = -\mathrm{M} \quad si \quad \Phi(t) \leq 0.$$

La proposition suivante donne le temps pour joindre deux états purs x_0 et x_f sur le cercle de rayon $\sqrt{\frac{2}{3}}$ pour u constant ($u = \mathrm{M}$ ou $u = -\mathrm{M}$). On note $\theta(0) = \theta_0$ et $\theta(t_f) = \theta_f$.

Proposition 1.4.1. *Le temps de transfert partant d'un état pur initial correspondant à θ_0 à un état pur final correspondant à θ_f par un contrôle constant u, est donné par (avec $\omega = \frac{-a\sqrt{2}+u}{a\sqrt{2}+u}$, $a\sqrt{2}+u \neq 0$).*

1) *Si $\omega > 0$ et $a \neq 0$, $t_f = \frac{\theta_f - \theta_0}{a} + \frac{2u}{a(a\sqrt{2}-u)}(arctan(\frac{tan(\frac{\theta_f}{2})}{\sqrt{w}}) - arctan(\frac{tan(\frac{\theta_0}{2})}{\sqrt{w}}))$.*

2) *Si $\omega < 0$ et $a \neq 0$, $t_f = \frac{\theta_f - \theta_0}{a} - \frac{u}{a\sqrt{|\omega|}(a\sqrt{2}+u)}(ln(\frac{|tan(\frac{\theta_f}{2}) - \sqrt{|\omega|}|}{|tan(\frac{\theta_f}{2}) + \sqrt{|\omega|}|}) - ln(\frac{|tan(\frac{\theta_0}{2}) - \sqrt{|\omega|}|}{|tan(\frac{\theta_0}{2}) + \sqrt{|\omega|}|}))$.*

3) *Soit $a = 0$, $t_f = \frac{\sqrt{2}}{u}(sin(\theta_0) - sin(\theta_f))$.*

Preuve. On a $\dot{\theta}(t) = a - \frac{u}{\sqrt{2}cos(\theta)}$, ce qui implique $\frac{\sqrt{2}cos(\theta)d\theta}{a\sqrt{2}cos(\theta)-u} = dt$, et par suite

$$d\theta + \frac{ud\theta}{a\sqrt{2}cos(\theta)-u} = adt, \text{ avec } cos(\theta) \neq \frac{u}{a\sqrt{2}}.$$

On intègre entre θ_0 et θ_f, u étant constant on trouve

$$\theta_f = \theta_0 - u\int_{\theta_0}^{\theta_f} \frac{d\theta}{a\sqrt{2}cos(\theta)-u} + at_f.$$

On en déduit que si $a \neq 0$

$$t_f = \frac{1}{a}(\theta_f - \theta_0 + u\int_{\theta_0}^{\theta_f} \frac{d\theta}{a\sqrt{2}cos(\theta)-u}).$$

Il suffit d'utiliser le calcul de l'intégrale $\int_{\theta_0}^{\theta_f} \frac{d\theta}{\alpha cos(\theta)+\beta}$, avec $\beta = -u$ et $\alpha = a\sqrt{2}$.

On pose $v = tan(\frac{\theta}{2})$ on obtient $cos(\theta) = \frac{1-v^2}{1+v^2}$ et $d\theta = \frac{2dv}{1+v^2}$, et alors

$$\int_{\theta_0}^{\theta_f} \frac{d\theta}{\alpha cos(\theta)+\beta} = \frac{2}{\beta-\alpha}\int_{v_0}^{v_f} \frac{dv}{v^2+w},$$

avec $\omega = \frac{\beta+\alpha}{\beta-\alpha}$, $\beta \neq \alpha$ donc $a\sqrt{2} \neq -u$.

Si $\omega > 0$ alors $\int_{\theta_0}^{\theta_f} \frac{d\theta}{\alpha cos(\theta)+\beta} = \frac{2}{\beta+\alpha}(arctan(\frac{tan(\frac{\theta_f}{2})}{\sqrt{w}}) - arctan(\frac{tan(\frac{\theta_0}{2})}{\sqrt{w}}))$.

Si $\omega < 0$ alors,

$\int_{\theta_0}^{\theta_f} \frac{d\theta}{\alpha cos(\theta)+\beta} = \frac{1}{\sqrt{|\omega|}(\beta-\alpha)}(ln|tan(\frac{\theta_f}{2}) - \sqrt{|\omega|}| - ln|tan(\frac{\theta_f}{2}) + \sqrt{|\omega|}| - ln|tan(\frac{\theta_0}{2}) - \sqrt{|\omega|}| + ln|tan(\frac{\theta_0}{2}) + \sqrt{|\omega|}|)$. Ce qui montre la proposition 5.1.

Si $a = 0$ on a, $\dot{\theta} = -\frac{u}{\sqrt{2}cos\theta}$ ce qui donne $\sqrt{2}cos\theta d\theta = -udt$, on trouve que

$$t_f = \frac{\sqrt{2}}{u}(sin(\theta_0) - sin(\theta_f)).$$

Comme nous le verrons dans l'exemple d'application il faudra tenir compte du fait que ce temps t_f est positif pour le choix des différents paramètres.

Analyse du temps de transfert. Nous analysons le temps de transfert dans le cas où $E_1^c - E_3^v = 2.56$. Nous avons $a = E_1^c - E_3^v - 2(b_5 - b_4) - (b_2 + \frac{2}{3}b_3)$ tels que $b_2 = R_{1212}^{c-v}$, $b_3 = R_{1313}^{c-v}$, $b_4 = R_{2323}^{v}$ et $b_5 = R_{2332}^{v}$. Posons $R = 2(b_5 - b_4) + (b_2 + \frac{2}{3}b_3)$ et on a, $a = E_1^c - E_3^v - R$. On veut évaluer l'influence du paramètre a sur le temps final de transfert t_f par l'effet des paramètres de Coulomb sur la fréquence de transition. On commence par donner le temps de transfert t_f en fonction de a. Sur le cercle des états purs, on fixe l'état initial $\theta_0 = \frac{\pi}{12}$ et l'état final $\theta_f = \frac{17\pi}{36}$.
$\theta_f - \theta_0 = \frac{14\pi}{36} = 1.222$, $tan(\frac{\theta_0}{2}) = 0.131$ et $tan(\frac{\theta_f}{2}) = 0.916$.
On utilise le temps final donné par l'assertion 1) de la proposition 5.1. On suppose un champ de contrôle constant $u = -M = -4$ et dans ce cas $\omega > 0$ et on obtient $t_f \geq 0$. On a $\frac{1}{\sqrt{\omega}} = \sqrt{\frac{\beta-\alpha}{\beta+\alpha}} = \sqrt{\frac{-u-a\sqrt{2}}{a\sqrt{2}-u}} = \frac{\sqrt{4-a\sqrt{2}}}{\sqrt{4+a\sqrt{2}}}$. L'expression de t_f en fonction de a est

$$t_f = \frac{1.222}{a} - \frac{8}{a(a\sqrt{2}+4)}(arctan(0.916\frac{\sqrt{4-a\sqrt{2}}}{\sqrt{4+a\sqrt{2}}}) - arctan(0.131\frac{\sqrt{4-a\sqrt{2}}}{\sqrt{4+a\sqrt{2}}})).$$

On choisit une fréquence de transition de la boîte quantique donnée dans l'article [FFW+99], donnée par $E_1^c - E_3^v = 2.56$ qui traduit la fréquence de transition entre le premier niveau d'énergie et le troisième niveau. De cette fréquence de transition nous considérons des valeurs successives raisonnables de R allant du plus faible au plus proche de $E_1^c - E_3^v$ ensuite on analyse le temps de transfert t_f. Nous considérons les différents cas suivants où on fait varier le paramètre de Coulomb R qui agit sur $a = E_1^c - E_3^v - R$.

Pour $E_1^c - E_3^v = 2.56$ on obtient

pour $R = 0.01$, $a = 2.55$ et $t_f = 0.406$

pour $R = 1.01$, $a = 1.55$ et $t_f = 0.464$

pour $R = 2.01$ $a = 0.55$ et $t_f = 1.363$.

Ces trois cas nous montrent qu'au fur et à mesure que l'énergie de Coulomb augmente le temps de transfert t_f augmente. On peut donc dire que lorsque l'action d'une énergie de Coulomb est faible par rapport à la fréquence de transition $E_1^c - E_3^v$ alors le temps de transfert peut être rapide tandis que quand l'action d'une énergie de Coulomb sur l'énergie de transition est forte tout en étant proche d'elle alors cela peut entrainer un temps de transfert long. Ainsi on peut conclure que quand l'ajout des énergies de Coulomb sont proches des fréquences de transition elles peuvent considérablement retarder le transfert de population entre niveaux d'énergie.

Si $a = 0$ ce qui est équivalent à $E_1^c - E_3^v = R$ dans ce cas le temps final ne dépend pas du paramètre a, on peut facilement le calculer en utilisant l'assertion 3) de la proposition 5.1. On trouve $t_f = \frac{\sqrt{2}}{u}(sin(\theta_0) - sin(\theta_f) = 0.260$, avec $u = -4$, $\theta_0 = \frac{\pi}{12}$ et $\theta_f = \frac{17\pi}{36}$.

1.4.2 Étude du cas pseudo-matrice de densité

L'intérêt de considérer cette matrice densité, dite pseudo-matrice de densité donnée dans [KKL16] réside dans le fait qu'elle permet une étude d'un système quantique à trois niveaux d'énergie qui se comporte comme un système quantique à deux niveaux d'énergie car elle représente des pseudo-états quantiques d'un système à deux niveaux. On veut donc dans cette partie regarder l'intérêt de considérer le comportement du système (Σ_3) comme un système à deux niveaux c'est-à-dire l'état x du système (Σ_3) appartenant à la sphère de rayon $\frac{2}{3}$ représente l'état d'un système quantique à deux niveaux. Dans le cas du système (Σ_1) représentant le système à deux niveaux étudié dans la section 1.3.1 nous avons vu que lorsque l'énergie de Coulomb perturbe fortement la fréquence de transition, la trajectoire de l'électron passe loin du pôle sud et reste dans la partie nord de la sphère de Bloch (Figure 2). De ce fait, nous utilisons le système (Σ_3) comme un système à deux niveaux pour une nouvelle approche de l'étude effectuée dans la section 1.3.1.

On considère le système (Σ_3) donné dans la section 1.1.3

$$(\Sigma_3) : \begin{cases} \dot{x_1} = a_1 x_2 x_3 - \frac{b_1}{2} x_1 x_3 - x_3 \omega_4 \\ \dot{x_2} = a_2 x_1 x_3 + \frac{b_1}{2} x_2 x_3 - x_3 \omega_2 \\ \dot{x_3} = a_3 x_1 x_2 + \frac{b_1}{2}(x_1^2 - x_2^2) + x_1 \omega_4 + x_2 \omega_2, \end{cases}$$

avec, $|\omega_1| \leq M$, $|\omega_2| \leq M$, $a_1 = \frac{3}{4}(E_1^c - E_2^v - b_2)$, $a_2 = \frac{3}{4}(E_3^v - E_1^c + b_3)$, $a_3 = \frac{3}{2}(E_3^v - E_2^v)$ et $a_1 + a_2 + a_3 = 0$. Rappelons que $b_1 = R_{1213}^{c-v}$, $b_2 = R_{1212}^{c-v}$ et $b_3 = R_{1313}^{c-v}$ représentent les interactions de Coulomb entre les niveaux. Et les énergies libres vérifient $E_3^v = \frac{1}{3}(b_2 - b_3) + E_2^v$. Pour obtenir ce système on a choisi $-b_1 = 3\omega_5$.

Dans le système (Σ_3), le paramètre $a_3 = \frac{3}{2}(E_3^v - E_2^v)$ et d'après la *remarque 1.1.7* il ne subit pas l'effet d'un paramètre de Coulomb dans la dynamique. Par ailleurs, nous avons l'égalité $3(E_3^v - E_2^v) = b_2 - b_3$ avec $b_2 = R_{1212}^{c-v}$ et $b_3 = R_{1313}^{c-v}$. La définition des paramètres de Coulomb nous donne pour $m = p$ et $n = q$,

$$R^{c-v}_{pqpq} = N^2 K \int\int \frac{|\Psi^c_p(r)|^2 |\Psi^v_q(r')|^2}{|r-r'|} dr dr'.$$

On voit donc que le calcul de ces paramètres ne dépend pas des niveaux d'énergie mais des caractéristiques de la boîte quantique (forme, taille). Par conséquent, pour une boîte quantique considérée, on peut choisir $b_2 = b_3$. Ce qui implique que $a_3 = 0$, c'est à dire $E^v_3 = E^v_2$. Le système (Σ_3) peut-être considéré comme un système à deux niveaux. En effet, le contrôle permettant, au temps t, une transition du premier état vers le second état est $\omega_2(t)$ et comme le contrôle $\omega_4(t)$ permet un transfert de population du premier état vers le troisième état alors l'état du système suivant représente celui d'un système à deux niveaux sous la condition $\omega_4 = 0$. On note $\omega_2 = u$.
Le système (Σ_3) s'écrit dans ce cas sous la forme plus simple suivante

$$(\Sigma_3): \begin{cases} \dot{x}_1 = (a x_2 - b x_1) x_3 \\ \dot{x}_2 = (-a x_1 + b x_2) x_3 - u x_3 \\ \dot{x}_3 = b(x_1^2 - x_2^2) + u x_2 \end{cases}$$

avec $a = \frac{3}{4}(E^c_1 - E^v_2 - R)$, $b = \frac{b_1}{2}$, $R = R^{c-v}_{1212}$ et $|u| \leq M$. x appartient à la sphère de rayon $\frac{2}{3}$ notée ici S_2 (car $\|x(t)\|^2 = \|x(0)\|^2$ avec $x(0) = (0, 0, \frac{2}{3})$.

On considère la fréquence de transition de la boîte quantique utilisée pour effectuer l'étude dans le cas à deux niveaux dans la section 1.3.1. On veut savoir quel est le comportement de ce système (Σ_3) si on maintient les mêmes effets du paramètre de Coulomb sur la fréquence de transition. Pour cela, on choisit la constante b de telle sorte qu'on puisque avoir une bonne approche de comparaison avec le système (Σ_1). Ensuite on analyse l'influence du paramètre $E^c_1 - E^v_2 - R$ sur le système (Σ_3). On traite le problème de synthèse en temps minimum basé sur les méthodes utilisées pour des systèmes en dimension deux.

Appliquons le principe de maximum de Pontryagin. On peut écrire le système (Σ_3) sous la forme $\dot{x} = F(x) + uBx$. L'hamiltonien correspondant est
$H(x(t), p(t), u(t)) = p_0 + p(t)(u(t)Bx(t) + F(x(t)))$.

$$\dot{p}(t) = -\frac{\partial H}{\partial x} = -p(t)(\frac{\partial F}{\partial x}(x(t)) + u(t)B).$$

La fonction de commutation est :

$$\Phi(t) = p\mathrm{B}x(t) = p_2(t)x_3(t) - p_3(t)x_2(t).$$

Puisque $|u| \leq \mathrm{M}$ (on suppose M = 1). Les contrôles extrémaux sont alors :

$u = -1 \quad si \quad \Phi(t) < 0$ et $u = 1 \quad si \quad \Phi(t) > 0$.

Analyse de la dynamique

On rappelle la fréquence de transition de la boîte B_1 étudiée à la section 1.3.1, on note $\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v = 0.287$. On considère le paramètre de Coulomb plus grand (respectivement plus petit) que la fréquence de transition, *i.e*, $\mathrm{R} = 10(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v)$ et $\mathrm{R} = \frac{1}{10}(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v)$. L'action du paramètre de Coulomb prise dans ces deux cas sur la fréquence de transition nous permet d'analyser l'influence du paramètre $\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v - \mathrm{R}$ sur la dynamique de l'électron par le système (Σ_3). Pour représenter cette dynamique, nous considérons le champ de contrôle $u = -1$ et le paramètre $b = -0.019$. Les points jaunes sur la sphère sont les pôles nord et sud associés aux points $(0, 0, \pm\frac{2}{3})$.

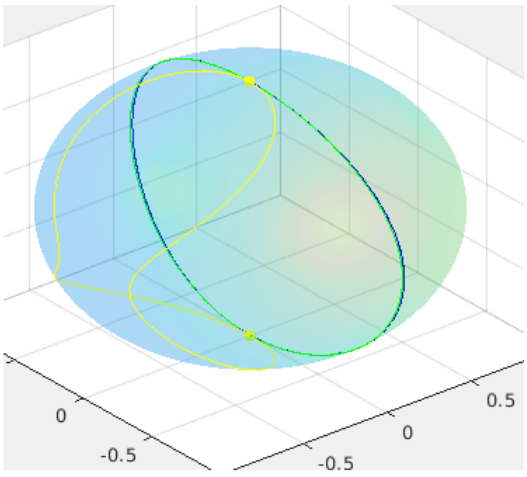

Figure 1.5: $\mathrm{R} = 10(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v)$ correspond à la courbe jaune, $\mathrm{R} = \frac{1}{10}(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v)$ la courbe verte et R = 0 la courbe en bleue.

Dans la figure 5, nous voyons que les courbes extrémales bleue et verte sont vraiment très proches ce qui montre que le faible ajout du paramètre de Coulomb sur la fréquence de transition n'apporte pas de modifications significatives à la trajectoire extrémale d'un électron par conséquent ne perturbe pas le transfert de population. Par ailleurs, on constate qu'il y a un grand écart entre la courbe jaune et celle en bleue, on a donc une grande modification de la trajectoire extrémale de l'électron lorsque le paramètre de Coulomb

agit fortement sur la fréquence de transition. Toutefois la courbe jaune passe par le pôle sud et il y a donc un transfert de population.

Comparativement au problème de contrôle en temps minimal associé au système dynamique (Σ_1) de deux niveaux, la courbe en jaune ici ne reste pas en haut de la sphère. L'allure des deux courbes jaunes donnée par les deux systèmes ((Σ_3) et (Σ_1)) est complètement différente. Dans la situation d'un faible ajout du paramètre de Coulomb sur la fréquence de transition, pour le cas du système (Σ_1) on remarque que les trajectoires de l'électron en absence et en présence du paramètre de Coulomb sont très proches, et présentent les mêmes allures (Figure 2). Les trajectoires de l'électron en absence et en présence du paramètre de Coulomb pour le système (Σ_3) affichent presque les mêmes comportements que celui du système dynamique (Σ_1). On voit bien à travers la figure 5 que les deux trajectoires sont quasiment identiques tout en étant très proches. D'après les figures 2 et 5, on peut dire que les trajectoires de l'électron ne présentent pas de grands changements pour un faible ajout du paramètre de Coulomb sur la fréquence de transition dans les deux systèmes.

Synthèse en temps minimal

On rappelle les différents ensembles suivants utiles à la réalisation d'une synthèse en temps minimal pour : (Σ_3) $\dot{x} = \mathrm{F}(x) + u\mathrm{G}(x)$, tel que $|u| \leq 1$ et $x \in \mathrm{S}_2$ $(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = \frac{4}{9})$.

$$\text{On note } \mathrm{F}(x) = \begin{pmatrix} (ax_2 - bx_1)x_3 \\ (-ax_1 + bx_2)x_3 \\ b(x_1^2 - x_2^2) \end{pmatrix} \text{ et } \mathrm{G}(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ -x_3 \\ x_2 \end{pmatrix} = \mathrm{B}x.$$

On obtient :

$$\Delta_1(x) = \mathrm{F}(x) \wedge \mathrm{G}(x) = (-ax_2x_3 + bx_1x_3)x\,;$$
$$\Delta_2(x) = \mathrm{G}(x) \wedge [\mathrm{F},\mathrm{G}](x) = (a(x_3^2 - x_2^2) + bx_1x_2)x.$$

L'ensemble des points où $\mathrm{F}(x)$ et $\mathrm{G}(x)$ sont parallèles, est :

$$\Delta_1^{-1}(0) = \{x \in \mathrm{S}_2, \quad x_3 = 0 \quad ou \quad ax_2 = bx_1\}.$$
$$\Delta_1^{-1}(0) = \{x_3 = 0\} \cap \mathrm{S}_2 \cup \{x_2 = \tfrac{b}{a}x_1, a \neq 0\} \cap \mathrm{S}_2,$$

L'ensemble des points où $\mathrm{G}(x)$ et $[\mathrm{F},\mathrm{G}](x)$ sont parallèles, est

$$\Delta_2^{-1}(0) = \{x \in \mathrm{S}_2, \quad a(x_3^2 - x_2^2) + bx_1x_2 = 0\}$$
$$\Delta_2^{-1}(0) = \{x \in \mathrm{S}_2, \quad x_3 = \pm\sqrt{x_2(x_2 - cx_1)} : x_2(x_2 - cx_1) \geq 0\},$$

avec $c = \frac{b}{a}$ et $a \neq 0$.

$$f(x) = -\frac{\Delta_2(x)}{\Delta_1(x)} = \frac{x_3^2 - x_2^2 + cx_1x_2}{x_3(x_2 - cx_1)}, \text{ avec } x_3(x_2 - cx_1) \neq 0.$$

Le signe de cette fonction permet de caractériser le comportement des trajectoires extrémales pour la réalisation d'une synthèse en temps minimal. On trouve

- $f(x) > 0$ sur $d_1 \cup d_3$ avec

$d_1 = \left\{x \in \mathrm{S}_2 : x_3 > 0, x_2 > 0, x_2(x_2 - cx_1) > 0 \quad et \quad x_3 > \sqrt{x_2(x_2 - cx_1)}\right\} \cup$
$\left\{x \in \mathrm{S}_2 : x_3 > 0, x_2(x_2 - cx_1) < 0, x_2 < 0 \quad et \quad x_3 < \sqrt{x_2(x_2 - cx_1)}\right\}.$

$d_3 = \left\{x \in \mathrm{S}_2 : x_3 < 0, x_2 > 0, x_2(x_2 - cx_1) > 0 \quad et \quad x_3 > -\sqrt{x_2(x_2 - cx_1)}\right\} \cup$
$\left\{x \in \mathrm{S}_2 : x_3 < 0, x_2(x_2 - cx_1) < 0, x_2 < 0 \quad et \quad x_3 < -\sqrt{x_2(x_2 - cx_1)}\right\}.$

- $f(x) < 0$ sur $d_2 \cup d_4$ avec

$d_2 = \left\{x \in \mathrm{S}_2 : x_3 > 0, x_2 > 0, x_2(x_2 - cx_1) > 0 \quad et \quad x_3 < \sqrt{x_2(x_2 - cx_1)}\right\} \cup$
$\left\{x \in \mathrm{S}_2 : x_3 > 0, x_2(x_2 - cx_1) < 0; x_2 < 0 \quad et \quad x_3 > \sqrt{x_2(x_2 - cx_1)}\right\}.$

$d_4 = \left\{x \in \mathrm{S}_2 : x_3 < 0, x_2 > 0, x_2(x_2 - cx_1) > 0 \quad et \quad x_3 < -\sqrt{x_2(x_2 - cx_1)}\right\} \cup$
$\left\{x \in \mathrm{S}_2 : x_3 < 0, x_2(x_2 - cx_1) < 0, x_2 < 0 \quad et \quad x_3 > -\sqrt{x_2(x_2 - cx_1)}\right\}.$

Le long d'une trajectoire extrémales $bang$ normales une commutation du contrôle peut se produire de -1 à $+1$ sur $\{f > 0\} = d_1 \cup d_3$. Tandis que sur $\{f < 0\} = d_2 \cup d_4$ une commutation du contrôle est possible de $+1$ à -1.

Calcul du contrôle singulier u_s. Un contrôle singulier admissible dans l'étude d'une synthèse en temps minimal permet de conduire une trajectoire singulière sur le lieu singulier *turnpike*. Le calcul de ce contrôle s'obtient par la relation (3)

$$u_s(x) = \frac{2a^2x_1x_2 - 3abx_2^2 + abx_1^2}{-4ax_2 + bx_1}, \text{ avec } -4ax_2 + bx_1 \neq 0.$$

La condition pour que u_s soit admissible est donnée par $|u_s| < 1$.
Pour $\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v = 0.287$ et $\mathrm{R} = 10(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v)$ on a $a = \frac{3}{4}(\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v - \mathrm{R}) = -1.93$. Et pour $b = -0.019$, la figure 6 donne une représentation du contrôle singulier permettant d'observer la condition $|u_s| < 1$. Ce contrôle singulier peut donc être utilisé pour conduire une trajectoire singulière dans le lieu singulier.

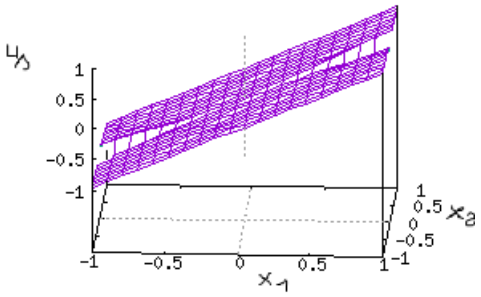

Figure 1.6: Le contrôle singulière $u_s(x)$.

Nous proposons dans cette partie une synthèse en temps minimal pour le cas $E_1^c - E_2^v = 0.287$, $R = 10(E_1^c - E_2^v)$ et $b = -0.019$. Donc $c = \frac{b}{a} = 0.01$. On commence par la représentation des lieux de singularité qui sont donnés par les fonctions suivantes $x_3 = \pm\sqrt{x_2(x_2 - 0.01x_1)}$. En effet, l'intersection des courbes de ces fonctions avec la sphère S_2 de rayon $\frac{2}{3}$ permet de dégager les différents zones de commutation du contrôle il est donc nécessaire de connaitre l'allure de ces courbes.

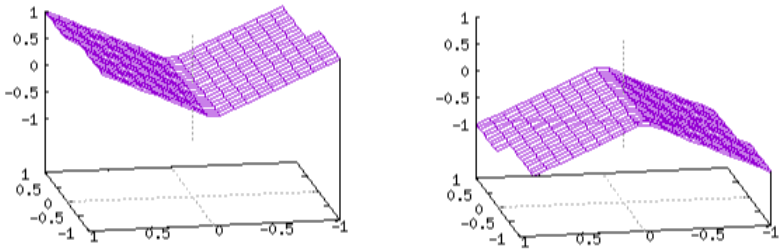

Figure 1.7: Lieux singuliers $x_3 = \pm\sqrt{x_2(x_2 - 0.01x_1)}$.

Pour délimiter les domaines d_i, $i \in \{1,2,3,4\}$ sur la sphère S_2 de rayon $\frac{2}{3}$, on considère l'intersection des courbes de ces fonctions $x_3 = \pm\sqrt{x_2(x_2 - 0.01x_1)}$ avec la sphère. Puis on utilise les droites d'équations $x_3 = 0$ et $x_2 = 0.01x_1$ pour finaliser la description de ces domaines. Nous avons $\|x(t)\|^2 = (1,0001)x_1^2 + x_3^2 = \frac{4}{9}$, on approxime sur la figure l'ensemble $\{x_2 = 0.01x_1\} \cap S_2$ par le cercle $x_1^2 + x_3^2 = \frac{4}{9}$. La figure ci-dessous nous donne les différents domaines sur la sphère S_2.

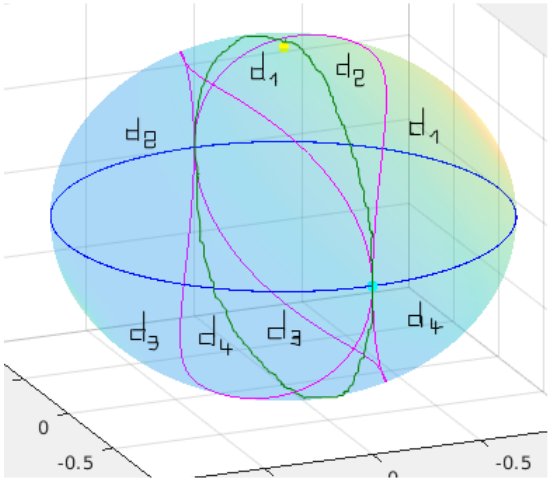

Figure 1.8: La courbe de couleur magenta est le lieu singulier. Les courbes de couleur bleue et verte sont respectivement pour $\{x_3 = 0\} \cap S_2$ et $\{x_2 = 0.01x_1\} \cap S_2$.

Comme avant on note x^- et x^+ les trajectoires extrémales *bang* correspondant respectivement aux contrôles $u = -1$ et $u = +1$. On note une trajectoire singulière par S. D'après la proposition 1.2.6, en un temps de commutation $\overline{t}$, nous avons
$\dot{\Phi}(\overline{t}) = f(\overline{t})$.

Si $\dot{\Phi}(\overline{t}) > 0$ alors le contrôle commute de $u = -1$ à $u = +1$.

Si $\dot{\Phi}(\overline{t}) < 0$ alors le contrôle commute de $u = +1$ à $u = -1$.

• Le long de la trajectoire extrémale *bang* x^- partant du point initial $(0, 0, \frac{2}{3})$ correspondant au pôle nord on entre dans le domaine d_1, le contrôle peut commuter de $u = -1$ à $u = +1$ car $\dot{\Phi} > 0$. Le long de la trajectoire x^+ issue de cette commutation après deux commutations elle rencontre la trajectoire x^- précédente où elle perd son optimalité au point d'intersection (point de coupure). On obtient la trajectoire *bang-bang* $x^-x^+x^-x^+$.

• Le long de la trajectoire x^- issue du point initial, on peut traverser le lieu de singularité. Appelons $\overline{q}$ le point auquel la trajectoire x^- atteint ce lieu. Dans un petit voisinage de $\overline{q}$ dans d_1 une commutation peut se produire car $\dot{\Phi} > 0$, le lieu de singularité peut être parcouru par une trajectoire optimale singulière car il est *turnpike*, en effet les champs $X^+ = F + G$ et $X^- = F - G$ sont respectivement orientés dans les domaines d_1 et d_2, cela permet de conduire une trajectoire optimale singulière par le contrôle singulier (voir définition 1.2.8). Nous avons une concaténation de trajectoires de types x^-x^+ et x^-S. Une trajectoire singulière peut quitter le lieu singulier avec le contrôle $u = \pm 1$. Il se forme ensuite les trajectoires $x^-Sx^+x^-$, $x^-Sx^-x^+x^-x^+$.

• Le long de la trajectoire x^- issue du point initial, dans le domaine d_2 nous avons $\dot{\Phi} < 0$,

le contrôle ne peut pas commuter.

• Le long de cette trajectoire x^- on entre dans le domaine d_3, elle peut y commuter car $\dot{\Phi} > 0$. Il se forme la trajectoire x^-x^+. Elle traverse le lieu singulier qui est *turnpike* pour les mêmes raisons qu'auparavant et il se forme la trajectoire $x^-\mathrm{S}$ et puisqu'une trajectoire singulière peut sortir du lieu singulier avec $u = \pm 1$ on a la construction des trajectoires de types $x^-\mathrm{S}x^+$ et $x^-\mathrm{S}x^-x^+$.

• Lorsqu'on entre dans le domaine d_4, elle ne peut pas commuter de $u = -1$ à $u = +1$, car nous avons $\dot{\Phi} < 0$.

• Le long de la trajectoire x^- venant du pôle nord, on passe par le pôle sud et on entre dans le domaine d_3. Le pôle sud est donc atteint par une trajectoire *bang*. On traverse le lieu de singularité qui est encore *turnpike*. Comme ce lieu peut contenir une trajectoire singulière on a la trajectoire $x^-\mathrm{S}$ qui se forme. De plus, une trajectoire singulière peut quitter le lieu singulier avec le contrôle $u = \pm 1$, on a ensuite une concaténation de trajectoires de types $x^-\mathrm{S}x^-$, $x^-\mathrm{S}x^+x^-$. On entre maintenant dans le domaine d_4 et comme $\dot{\Phi} < 0$ une commutation du contrôle de $u = -1$ à $u = +1$ n'est pas possible.

• Le long de la trajectoire x^- venant du point initial on entre dans d_1. Ensuite elle intersecte la trajectoire x^+ issue du point $\overline{q}$ où elle perd son optimalité au point de coupure.

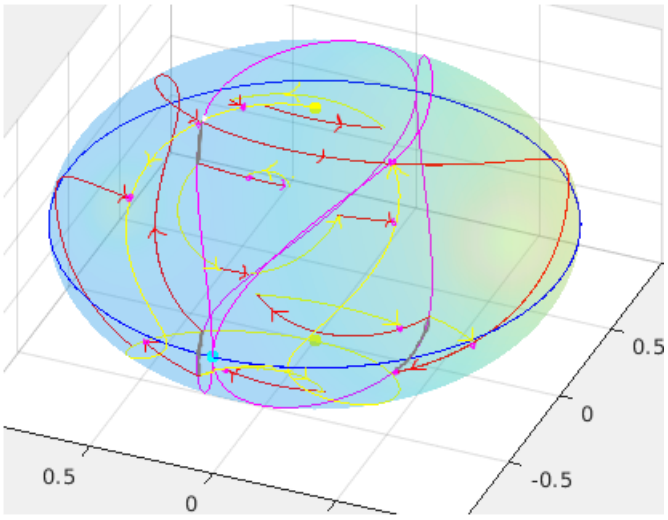

Figure 1.9: Les courbes de couleur rouge et jaune sont respectivement pour $u = +1$ et $u = -1$. Les points de couleur magenta sont les points de coupure. Le point blanc est le point $\overline{q}$. La trajectoire en gris est la trajectoire singulière.

• Si la trajectoire extrémale *bang* issue du point initial est anormale alors deux situations se présentent, soit elle commute sur $\{x_3 = 0\} \cap S_2$ soit sur $\{x_2 = 0.01x_1\} \cap S_2$.

1) Si la commutation du contrôle se produit sur $\{x_3 = 0\} \cap S_2$, alors après deux commutations la trajectoire perd son optimalité.

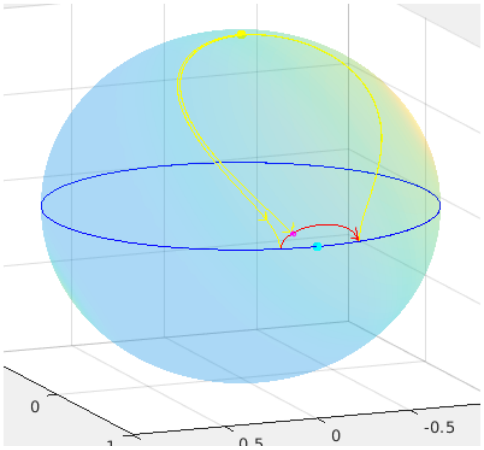

Figure 1.10: Les courbes de couleur jaune et rouge sont respectivement pour $u = -1$ et $u = +1$. La courbe en couleur bleue est un lieu de commutation. Le point de couleur magenta est le point de coupure.

2) Si la commutation du contrôle se produit sur $\{x_2 = 0.01x_1\} \cap S_2$, après une commutation l'extrémale *bang* anormale perd son optimalité. On approxime sur la figure suivante l'ensemble $\{x_2 = 0.01x_1\} \cap S_2$ par le cercle $x_1^2 + x_3^2 = \frac{4}{9}$ pour considérer le lieu de commutation.

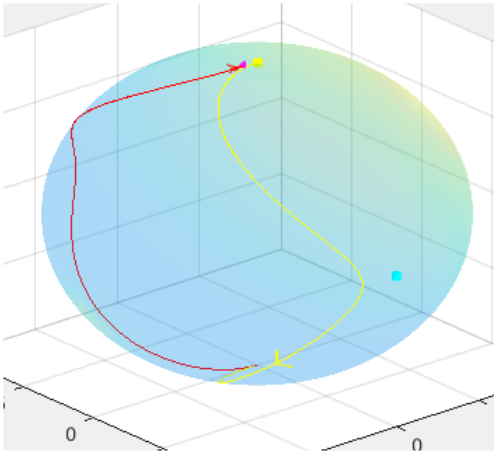

Figure 1.11: Les courbes de couleur jaune et rouge sont respectivement pour $u = -1$ et $u = +1$, le point de couleur magenta est le point de coupure.

Conclusion et comparaison. Lorsque l'état du système (Σ_3) est considéré comme celui d'un système à deux niveaux tout en étant dans la situation où le paramètre de Coulomb agit fortement sur la fréquence de transition, alors la trajectoire optimale normale partant du pôle nord est de types *bang-bang*, x^-, x^-x^+, $x^-x^+x^-x^+$ ou *bang-singulier-bang*, $x^-\mathrm{S}$, $x^-\mathrm{S}x^-$, $x^-\mathrm{S}x^+$, $x^-\mathrm{S}x^-x^+$, $x^-\mathrm{S}x^+x^-$, $x^-\mathrm{S}x^-x^+x^-x^+$. Comparativement au système dynamique (Σ_1) les trajectoires *bang-bang* construites ici peuvent contenir une trajectoire singulière. De plus le pôle sud est atteint par une trajectoire extrémale *bang*. Ce qui nous montre qu'avec ce système (Σ_3), même si la fréquence de transition est fortement perturbée par l'énergie de Coulomb, il permettrait facilement un transfert de population. En outre, lorsque la trajectoire extrémale quittant le point initial est anormale, la trajectoire optimale est de types *bang-bang* $x^-x^+x^-$ (voir Figure 10), x^-x^+ (voir Figure 11). La trajectoire *bang-bang* anormale construite et induite par la commutation sur l'ensemble $\{x_3 = 0\} \cap \mathrm{S}_2$ (voir Figure 10) reste au dessus du plan $\{x_3 = 0\}$, d'où les points en dessous de ce plan ne peuvent être atteints de façon optimale par la trajectoire extrémale anormale commutant sur ce plan. Dans le cas de la trajectoire *bang-bang* anormale obtenue par la commutation s'effectuant sur l'ensemble $\{x_2 = 0.01x_1\} \cap \mathrm{S}_2$ (voir Figure 11) les points sont seulement atteints de manière optimale dans le demi-plan $\{x_2 \geq 0.01x_1\}$. Par ailleurs, à la différence du système (Σ_1) (voir Figure 3 à droite), la trajectoire extrémale anormale effectue cinq commutations avant de perdre son optimalité. Et un point considéré sur la sphère peut être atteint de manière optimale étant en dessous ou au-dessus de l'ensemble $\{x_3 = 0\} \cap \mathrm{S}^2$.

1.5 Analyse des trajectoires pour un modèle à quatre niveaux d'énergie

Dans cette partie on étudie le problème de contrôle en temps minimal pour le système (Σ_4) associé au modèle à quatre niveaux donné dans la section 1.1.4. On a trouvé :

$$(\Sigma_4)\quad \begin{cases} \dot{x_1} = a_1 x_2 - c x_3 x_5 + b x_2 x_6 \\ \dot{x_2} = -a_1 x_1 + c x_3 x_4 - b x_1 x_6 - u_1 x_3 \\ \dot{x_3} = c(x_1 x_5 - x_2 x_4) + u_1 x_2 \\ \dot{x_4} = a_2 x_5 - c x_2 x_6 + b x_3 x_5 \\ \dot{x_5} = -a_2 x_4 + c x_1 x_6 - b x_3 x_4 - u_2 x_6 \\ \dot{x_6} = c(x_2 x_4 - x_1 x_5) + u_2 x_5, \end{cases}$$

avec $|u_i| \leq 1$ ($on\ prend\ \mathrm{M} = 1$) pour $i \in \{1,2\}$, $a_1 = \mathrm{E}_2^{\nu} - \mathrm{E}_1^{c} - \mathrm{R}$, $a_2 = \mathrm{E}_1^{\nu} - \mathrm{E}_2^{c} - \mathrm{R}'$ avec

$\mathrm{R} = \frac{1}{2}(-3\mathrm{R}_1' + 3\mathrm{R}_0' - \mathrm{R}_1 + \mathrm{R}_0) - \mathrm{R}_3 - \frac{1}{4}(3\mathrm{R}_2 + \mathrm{R}_4)$,

$\mathrm{R}' = \frac{1}{2}(-3\mathrm{R}_1' + 3\mathrm{R}_0' - \mathrm{R}_1 + \mathrm{R}_0) - \mathrm{R}_3 - \frac{1}{4}(\mathrm{R}_2 + 3\mathrm{R}_4)$,

$b = \frac{1}{2}(\mathrm{R}_1' - \mathrm{R}_0' - \mathrm{R}_0 + \mathrm{R}_1) + \frac{1}{2}(\mathrm{R}_2 + \mathrm{R}_4)$ et $c = \frac{1}{2}\mathrm{R}_5$.

Rappelons que :

$\mathrm{R}_0 = \mathrm{R}^{c}_{1212} = \mathrm{R}^{c}_{2121}$, $\mathrm{R}_0^{'} = \mathrm{R}^{\nu}_{1212} = \mathrm{R}^{\nu}_{2121}$

$\mathrm{R}_1 = \mathrm{R}^{c}_{1221} = \mathrm{R}^{c}_{2112}$, $\mathrm{R}_1^{'} = \mathrm{R}^{\nu}_{1221} = \mathrm{R}^{\nu}_{2112}$

$\mathrm{R}_2 = \mathrm{R}^{c-\nu}_{1111}$, $\mathrm{R}_3 = \mathrm{R}^{c-\nu}_{1212} = \mathrm{R}^{c-\nu}_{2121}$

$\mathrm{R}_4 = \mathrm{R}^{c-\nu}_{2222}$ et $\mathrm{R}_5 = \mathrm{R}^{c-\nu}_{2211} = \mathrm{R}^{c-\nu}_{1122}$.

Nous avons considéré une matrice de densité ρ par bloc correspondant aux vecteurs de Bloch $x = (x_1, x_2, x_3)^t$ et $y = (x_4, x_5, x_6)^t$. On a vu que $x_1\dot{x}_1 + x_2\dot{x}_2 + x_3\dot{x}_3 = 0$; $x_4\dot{x}_4 + x_5\dot{x}_5 + x_6\dot{x}_6 = 0$ et que $\sum_{j=1}^{6} x_j\dot{x}_j = 0$. Donc pour $x(0) = (0,0,1)$ et $y(0) = (0,0,1)$, on a pour tout $t \geq 0$ et pour tous contrôles u_1 et u_2,
$\|x(t)\|^2 = \|x(0)\|^2 = 1$ et $\|y(t)\|^2 = \|y(0)\|^2 = 1$, et alors $x(t)$, $y(t) \in \mathrm{S}^2 \subset \mathbb{R}^3$. Mais $x(t)$ et $y(t)$ n'évoluent pas indépendamment, il y a une interaction entre ces deux vecteurs de Bloch.

1.5.1 Symétrie et interaction dans la dynamique du système

Nous allons montrer une symétrie dans la dynamique des vecteurs de Bloch x et y et caractériser l'interaction de Coulomb entre ces deux vecteurs, lorsque $a_1 = a_2$.

On peut choisir l'hamiltonien libre $\mathrm{H}_0 = diag(\mathrm{E}_1^c, \mathrm{E}_2^v, \mathrm{E}_2^c, \mathrm{E}_1^v)$ tel que les deux différences d'énergie $\mathrm{E}_1^c - \mathrm{E}_2^v$ et $\mathrm{E}_2^c - \mathrm{E}_1^v$ soient égales et on obtient que $a_1 = a_2 = a$, ($\mathrm{E}_2^v - \mathrm{E}_1^c - \mathrm{R} = \mathrm{E}_1^v - \mathrm{E}_2^c - \mathrm{R}'$). Par conséquent $\mathrm{R}_2 = \mathrm{R}_4$, c'est à dire, $\mathrm{R}_{1111}^{c-v} = \mathrm{R}_{2222}^{c-v}$. Cette condition est physiquement réalisable car la définition sur les paramètres de Coulomb nous donne pour $m = p = n = q$, pour une boîte quantique considérée,

$$\mathrm{R}_{pppp}^{c-v} = \mathrm{N}^2\mathrm{K}\int\int \frac{|\Psi_p^c(r)|^2|\Psi_p^v(r')|^2}{|r-r'|}drdr'.$$

Le calcul de ce paramètre ne dépend pas des niveaux d'énergie mais des caractéristiques (forme, taille) de la boîte quantique.

Le système (Σ_4) devient lorsque $a_1 = a_2 = a$:

$$\begin{cases} \dot{x_1} = ax_2 + bx_6x_2 - cx_3x_5, \\ \dot{x_2} = -ax_1 - u_1x_3 - bx_6x_1 + cx_4x_3, \\ \dot{x_3} = u_1x_2 + c(x_1x_5 - x_4x_2), \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \dot{x_4} = ax_5 + bx_3x_5 - cx_2x_6, \\ \dot{x_5} = -ax_4 - u_2x_6 - bx_3x_4 + cx_1x_6, \\ \dot{x_6} = u_2x_5 + c(x_2x_4 - x_1x_5). \end{cases}$$

La proposition suivante montre que les vecteurs x et y jouent un rôle symétrique dans la dynamique de (Σ_4) et que la partie linéaire du système (Σ_4) correspond à un système à deux niveaux pour chaque vecteur de Bloch $x(t)$ et $y(t)$ et la partie non linéaire qui représente l'interaction de Coulomb, est un produit vectoriel des deux vecteurs $x(t)$ et $y(t)$. On pose

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} 0 & a & 0 \\ -a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \mathrm{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \mathrm{C} = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}.$$

Proposition 1.5.1. *La dynamique du système* (Σ_4) *s'écrit*

$$(\Sigma_4) \quad \begin{cases} \dot{x} = (\mathrm{A} + u_1\mathrm{B})x + x \wedge \mathrm{C}y \\ \dot{y} = (\mathrm{A} + u_2\mathrm{B})y + y \wedge \mathrm{C}x. \end{cases}$$

Preuve: On considère la matrice $\Omega(v) = \begin{pmatrix} 0 & v_3 & -v_2 \\ -v_3 & 0 & v_1 \\ v_2 & -v_1 & 0 \end{pmatrix}$, pour tout $v = (v_1\ v_2\ v_3)^t$. On sait que cette matrice orthogonale $\Omega(v)$ peut s'identifier au vecteur v. On a par un simple calcul que pour tout $x \in \mathbb{R}^3$, $x \wedge v = \Omega(v)x$. En particulier on a

$$x \wedge \mathrm{C}y = \begin{pmatrix} bx_6x_2 - cx_3x_5 \\ -bx_6x_1 + cx_4x_3 \\ c(x_1x_5 - x_4x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & bx_6 & -cx_5 \\ -bx_6 & 0 & cx_4 \\ cx_5 & -cx_4 & 0 \end{pmatrix} x = \Omega(\mathrm{C}y)x.$$

De même on a $y \wedge \mathrm{C}x = \Omega(\mathrm{C}x)y$.

On peut alors écrire le système (Σ_4) sous la forme

$\dot{x} = (\mathrm{A} + u_1\mathrm{B})x + \Omega(\mathrm{C}y)x$ et $\dot{y} = (\mathrm{A} + u_2\mathrm{B})y + \Omega(\mathrm{C}x)y$,

On pose $\mathrm{Z} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$. On sait que pour tout $t \geq 0$ et pour tous contrôles u_1 et u_2 on a $\|\mathrm{Z}(t)\|^2 = \|\mathrm{Z}(0)\|^2 = 2$. Donc $\mathrm{Z}(t)$ appartient à la sphère de rayon $\sqrt{2}$ dans $\mathbb{R}^6$. On écrit :

$$(\Sigma_4) \quad \dot{\mathrm{Z}} = \begin{pmatrix} \mathrm{A} + u_1\mathrm{B} & 0 \\ 0 & \mathrm{A} + u_2\mathrm{B} \end{pmatrix} \mathrm{Z} + \begin{pmatrix} x \wedge \mathrm{C}y \\ y \wedge \mathrm{C}x \end{pmatrix}$$

On applique le principe de maximum de Pontryagin à ce système pour aller de $\mathrm{Z}(0)$ à $\mathrm{Z}(t_f)$ en temps minimal.

On pose $\mathrm{P}(t) = (P_1(t), P_2(t))$ le vecteur adjoint, $P_1(t) = (p_1(t), p_2(t), p_3(t))$ et $P_2(t) = (p_4(t), p_5(t), p_6(t))$. L'hamiltonien s'écrit $\mathrm{H}(\mathrm{Z}, \mathrm{P}, u) = p_0 + P_1\dot{x} + P_2\dot{y}$. Et donc on obtient

$\mathrm{H}(\mathrm{Z}, \mathrm{P}, u) = p_0 + P_1((\mathrm{A} + u_1\mathrm{B})x + x \wedge \mathrm{C}y) + P_2((\mathrm{A} + u_2\mathrm{B})y + y \wedge \mathrm{C}x)$.

Proposition 1.5.2. *La dynamique du vecteur adjoint est donnée par*

$$\begin{cases} \dot{P}_1^t = (\mathrm{A} + u_1\mathrm{B})P_1^t + (P_1^t \wedge \mathrm{C}y) - \mathrm{C}(P_2^t \wedge y) \\ \dot{P}_2^t = (\mathrm{A} + u_2\mathrm{B})P_2^t + (P_2^t \wedge \mathrm{C}x) - \mathrm{C}(P_1^t \wedge x), \end{cases}$$

où P_i^t désigne le vecteur colonne transposé de P_i.

On montre le lemme suivant qu'on utilisera dans la preuve de cette proposition

Lemme 1.5.3. *Pour tous $x, y \in \mathbb{R}^3$ et tout vecteur ligne $q \in \mathbb{R}^3$, et pour toute matrice* $(3,3)$ *à coefficients réels* D *on a*

1) $\frac{\partial}{\partial x}(x \wedge y) = \Omega(y)$.

2) $\frac{\partial}{\partial x} q(x \wedge y) = -(q^t \wedge y)^t$.

3) $\frac{\partial}{\partial x} q(\mathrm{D}x \wedge y) = -(q^t \wedge y)^t \mathrm{D} = -(\mathrm{D}q^t \wedge y)^t$.

Preuve du lemme: On a $x \wedge y = \Omega(y)x$ et donc $\frac{\partial}{\partial x}(x \wedge y) = \Omega(y)$.

On en déduit que $\frac{\partial}{\partial x} q(x \wedge y) = \frac{\partial}{\partial x} q\Omega(y)x = q\Omega(y)$. Il est clair que $q\Omega(y) = -(\Omega(y)q^t)^t = -(q^t \wedge y)^t$.

On a $\mathrm{D}x \wedge y = \Omega(y)\mathrm{D}x$. On en déduit que $\frac{\partial}{\partial x}(\mathrm{D}x \wedge y) = \frac{\partial}{\partial x}\Omega(y)\mathrm{D}x = \Omega(y)\mathrm{D}$.

Par ailleurs, $\frac{\partial}{\partial x} q(\mathrm{D}x \wedge y) = \frac{\partial}{\partial x} q\Omega(y)\mathrm{D}x = q\Omega(y)\mathrm{D}$. On obtient que $q\Omega(y)\mathrm{D} = -(q^t \wedge y)^t \mathrm{D} = -(\mathrm{D}q^t \wedge y)^t$. Ce qui montre le lemme.

Preuve de la proposition 1.5.2 : L'hamiltonien est

$$\mathrm{H}(\mathrm{Z}, \mathrm{P}, u) = p_0 + P_1((\mathrm{A} + \mathrm{B}u_1)x + x \wedge \mathrm{C}y) + P_2((\mathrm{A} + \mathrm{B}u_2)y + y \wedge \mathrm{C}x).$$

En utilisant le lemme 1.5.3 pour $\mathrm{D} = \mathrm{C}$ et $q = \mathrm{P}_i$, $i = 1,2$, on trouve que

$\dot{\mathrm{P}}_1 = -\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial x} = -P_1(\mathrm{A} + \mathrm{B}u_1) - \frac{\partial}{\partial x}\mathrm{P}_1(x \wedge \mathrm{C}y) - \frac{\partial}{\partial x}\mathrm{P}_2(y \wedge \mathrm{C}x)$

$= -P_1(\mathrm{A} + u_1\mathrm{B}) + (P_1^t \wedge \mathrm{C}y)^t - (P_2^t \wedge y)^t \mathrm{C}$; (puisque $\mathrm{P}_2(y \wedge \mathrm{C}x) = -\mathrm{P}_2(\mathrm{C}x \wedge y)$).

$\dot{\mathrm{P}}_2 = -\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial y} = -P_2(\mathrm{A} + \mathrm{B}u_2) - \frac{\partial}{\partial y}\mathrm{P}_1(x \wedge \mathrm{C}y) - \frac{\partial}{\partial y}\mathrm{P}_2(y \wedge \mathrm{C}x)$. Et donc

$\dot{P}_2 = -P_2(\mathrm{A} + u_2\mathrm{B}) - (P_1^t \wedge x)^t \mathrm{C} + (P_2^t \wedge \mathrm{C}x)^t$. Ce qui montre la proposition 1.5.2.

La condition de maximisation du (PMP) donne les fonctions de commutation:

$$\Phi_1(t) = P_1\mathrm{B}x(t) = p_3(t)x_2(t) - x_3(t)p_2(t) \quad \text{et}$$

$$\Phi_2(t) = P_2\mathrm{B}y(t) = p_6(t)x_5(t) - x_6(t)p_5(t).$$

Notons que Φ_i, $i \in \{1,2\}$ est la fonction de commutation pour un système à deux niveaux. Et si $\Phi_i(t) > 0$ alors $u_i = 1$ et si $\Phi_i(t) < 0$ alors $u_i = -1$.

(Σ_4) est un système affine avec deux contrôles qui évolue sur la sphère de $\mathbb{R}^6$ de rayon $\sqrt{2}$. On écrit

$$(\Sigma_4) \quad \dot{\mathrm{Z}}(t) = \mathrm{F}(\mathrm{Z}(t)) + u_1(t)\mathrm{G}_1(\mathrm{Z}(t)) + u_2(t)\mathrm{G}_2(\mathrm{Z}(t))$$

avec $\mathrm{F}(\mathrm{Z}) = \begin{pmatrix} \mathrm{A}x + x \wedge \mathrm{C}y \\ \mathrm{A}y + y \wedge \mathrm{C}x \end{pmatrix}$, $\mathrm{G}_1(\mathrm{Z}) = \mathrm{B}x$ et $\mathrm{G}_2(\mathrm{Z}) = \mathrm{B}y$.

Malgré le fait que les vecteurs de Bloch x et y jouent le même rôle dans la dynamique de (Σ_4), il est difficile de faire une synthèse en temps minimal, puisque $Z \in \mathbb{R}^6$ et il y a une interaction entre x et y qui apparait dans le produit vectoriel. Nous allons considérer deux cas particuliers pour simplifier ce système (Σ_4).

• Si $b = c$, (b et c sont des constantes qui dépendent des paramètres de Coulomb), alors le système (Σ_4) s'écrit

$$\begin{cases} \dot{x} = (A + u_1 B)x + bx \wedge y \\ \dot{y} = (A + u_2 B)y - bx \wedge y. \end{cases}$$

Le système adjoint est

$$\begin{cases} \dot{P_1^t} = (A + u_1 B)P_1^t + b(P_1 - P_2)^t \wedge y \\ \dot{P_2^t} = (A + u_2 B)P_2^t + b(P_2 - P_1)^t \wedge x. \end{cases}$$

Si en plus $u_1 = u_2 = u$ alors la somme des vecteurs de Bloch $U = x + y$ satisfait la dynamique $\dot{U} = (A + Bu)U$ qui représente un système bilinéaire correspondant à un système avec deux niveaux d'énergie. Par contre pour la dynamique adjointe,
pour $V = (P_1 + P_2)^t$ on trouve que $\dot{V}(t) = (A + Bu)V + b(P_1 - P_2)^t \wedge (y - x)$.
Et pour $W = (P_1 - P_2)^t$ on trouve que
$\dot{W}(t) = (A + Bu)W + bW \wedge (x + y) = (A + Bu)W + bW \wedge U$.
Dans les deux cas la dynamique adjointe ne correspond pas à celle d'un système à deux niveaux. Ceci est dû au fait des interactions.

• Si on choisit une paramétrisation de la matrice de densité ρ telle que $x = y$ et $u_1 = u_2 = u$ alors les deux sous systèmes de (Σ_4) pour chaque vecteur de Bloch x suivent la dynamique

$$(\Sigma_5) \quad \dot{x} = (A + uB)x + x \wedge Cx$$

qui représente un système avec une interaction de Coulomb (lorsque $b \neq c$) et qui évolue sur la sphère S^2 de $\mathbb{R}^3$. On écrit

$\dot{x} = F(x) + uG(x)$

avec, $\mathrm{F}(x) = \begin{pmatrix} ax_2 + (b-c)x_2x_3 \\ -ax_1 - (b-c)x_1x_3 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $\mathrm{G}(x) = \mathrm{B}x = \begin{pmatrix} 0 \\ -x_3 \\ x_2 \end{pmatrix}$.

L'hamiltonien s'écrit

$$\mathrm{H}(x,p,u) = p_0 + p\dot{x} = p_0 + p(\mathrm{A}+u\mathrm{B})x + p(x \wedge \mathrm{C}x).$$

La fonction de commutation est $\Phi(t) = p\mathrm{B}x(t)$ et la dynamique adjointe associée à (Σ_5) est donnée par

$$\dot{p^t} = (\mathrm{A}+u\mathrm{B})p^t + (p^t \wedge \mathrm{C}x) - \mathrm{C}(p^t \wedge x)$$

que l'on peut écrire plus simplement

$$\dot{p^t} = (\mathrm{A}+u\mathrm{B})p^t + (b-c)\begin{pmatrix} p_2x_3 \\ -p_1x_2 \\ p_2x_1 - p_1x_2 \end{pmatrix}$$

Notons que dans ce cas si en plus $b = c$ on obtient alors la même dynamique obtenue pour le système à deux niveaux (Σ_1) pour le vecteur d'état et pour le vecteur adjoint : $\dot{x} = (\mathrm{A}+u\mathrm{B})x \;\; et \;\; \dot{p^t} = (\mathrm{A}+u\mathrm{B})p^t$. Mais en pratique et par définition des paramètres de Coulomb les constantes b et c ne sont pas forcément égales.

Les trajectoires solutions du système (Σ_5) avec $b \neq c$ pour $u = \pm 1$, sont caractérisées dans le théorème suivant.

Théorème 1.5.4. *Les fonctions coordonnées $x_i(t)$, $1 \leq i \leq 3$, des trajectoires $x(t)$ associées aux contrôles constants $u = 1$ ou $u = -1$ pour (Σ_5), sont des fonctions elliptiques.*

Preuve. On a pour $u(t) = 1$, $\dot{x}_3(t) = x_2(t)$ et $\dot{x}_1(t) = ax_2 + (b-c)x_2x_3$. On en déduit que $\dot{x}_1(t) = a\dot{x}_3(t) + (b-c)\dot{x}_3x_3 = a\dot{x}_3(t) + \frac{1}{2}(b-c)\dot{x_3^2}$. Donc

$$x_1(t) = ax_3(t) + \tfrac{1}{2}(b-c)x_3^2 + k, \; avec \; k = -a - \tfrac{1}{2}(b-c),$$

(puisque $x(0) = (0\,0\,1)^t$). Par ailleurs, on a $\ddot{x}_3 = \dot{x}_2 = -ax_1 - (b-c)x_1x_3 - x_3$. On exprime x_1 en fonction de x_3 et alors

$\ddot{x}_3 = -a(ax_3(t) + \frac{1}{2}(b-c)x_3^2 + k) - (b-c)(ax_3(t) + \frac{1}{2}(b-c)x_3^2 + k)x_3 - x_3$. Et donc

$$\ddot{x}_3 = \alpha x_3^3 + \beta x_3^2 + \gamma x_3 - ak \qquad (7)$$

avec $\alpha = -\frac{1}{2}(b-c)^2$, $\beta = -\frac{3}{2}a(b-c)$, $\gamma = -(a^2+1+(b-c)(a+\frac{1}{2}(b-c)))$. Il est clair que $\alpha \neq 0$ et $\beta \neq 0$, lorsque $b \neq c$, et $a \neq 0$ et $k \neq 0$.

Il est connu [Sie62] que si $(\alpha,\beta) \neq (0,0)$ alors les solutions de cette équation différentielle d'ordre 2, sont elliptiques et si en particulier $(\gamma, ak) = (0,0)$ alors les solutions de $\ddot{x}_3 = \alpha x_3^3 + \beta x_3^2$ lorsque $\alpha \neq 0$ sont des fonctions elliptiques de Jacobi.
Notons que $k = 0$ si $2a = c - b$ et que dans ce cas $\gamma = -(a^2+1) \neq 0$ et $\beta = \frac{3}{4}(b-c)^2$.
Les fonctions elliptiques de Weierstrass sont les solutions de $\ddot{v} = 4v^3 + g_2 v^2 + g_3 v$, pour des constantes spécifiques g_2 et g_3 connues.
Pour $u = -1$, on trouve les même coefficients α et β et

$$\ddot{x}_3 = \alpha x_3^3 + \beta x_3^2 + \tilde{\gamma} x_3 - ak \qquad (8)$$

avec $\tilde{\gamma} = -a^2 + 1 - (b-c)(a+\frac{1}{2}(b-c))$.
Dans ce cas si $k = 0$, $(2a = c - b)$ alors $\tilde{\gamma}$ s'annule pour $a^2 = 1$ et donc x_3 solution de (8) est une fonction elliptique de Jacobi.
On en déduit que pour $u = \pm 1$, x_3 est elliptique et donc x_2 est elliptique puisque que la dérivée d'une fonction elliptique est aussi elliptique, et que x_1 est elliptique puisque le produit et la somme de fonctions elliptiques sont elliptiques. Ce qui montre le théorème 1.5.4.

D'autres propriétés de fonctions elliptiques sont rappelées avec plus de détails dans la deuxième partie de la thèse.

Rappelons que pour le système à deux niveaux (Σ_1), qui correspond à (Σ_5) avec $(b = c)$ nous avons trouvé que les fonctions coordonnées $x_i(t)$ pour $1 \leq i \leq 3$, des trajectoires $x(t)$ associées à $u = \pm 1$ obtenues sont des fonctions trigonométriques. On peut retrouver ce résultat en utilisant les équations (7) et (8) avec $\alpha = \beta = 0$, $\gamma = -(a^2+1)$, $k = -a$ et $\tilde{\gamma} = -a^2 + 1$.

On va faire une étude et une synthèse en temps minimal pour (Σ_5) lorsque $b \neq c$ comme celles faites pour le système à deux niveaux (Σ_1) et pour le système à trois niveaux (Σ_3).

1.5.2 Analyse de trajectoires extrémales

On présente une analyse des propriétés qualitatives d'une trajectoire extrémale concernant la synthèse en temps minimal pour ce système (Σ_5). On n'effectuera pas comme avant ((Σ_1) et (Σ_3)) une synthèse complète qui consisterait à donner toutes les stratégies de commutation.

(Σ_5) $\dot{x} = \mathrm{F}(x) + u\mathrm{G}(x)$, avec $|u| \leq 1$ et $x \in \mathrm{S}^2 \subset \mathbb{R}^3$.

$$\mathrm{F}(x) = \begin{pmatrix} ax_2 + (b-c)x_2x_3 \\ -ax_1 - (b-c)x_1x_3 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } \mathrm{G}(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ -x_3 \\ x_2 \end{pmatrix} = \mathrm{B}x.$$

On trouve que,

$$[\mathrm{F},\mathrm{G}](x) = \begin{pmatrix} ax_3 + (b-c)(x_3^2 - x_2^2) \\ (b-c)x_1x_2 \\ -ax_1 - (b-c)x_1x_3 \end{pmatrix} \text{ et}$$

$$\Delta_1(x) = -(ax_2 + (b-c)x_2x_3)x \text{ et } \Delta_2(x) = (ax_3 + (b-c)(x_3^2 - x_2^2))x.$$

Donc

$$\Delta_1^{-1}(0) = \{x \in \mathrm{S}^2, \quad x_2 = 0 \quad ou \quad x_3 = -q\}, \text{ avec } q = \tfrac{a}{b-c} \text{ et } b \neq c$$
$$\Delta_2^{-1}(0) = \{x \in \mathrm{S}^2, \quad (qx_3 + x_3^2 - x_2^2) = 0\} \text{ que l'on peut écrire}$$
$$\Delta_2^{-1}(0) = \{x \in \mathrm{S}^2, \quad x_2 = \pm\sqrt{x_3(x_3+q)} \quad et \quad x_3(x_3+q) \geq 0\}.$$

La fonction f est donnée par $f(x) = \frac{x_3(x_3+q)-x_2^2}{x_2(x_3+q)}$, $\quad avec \quad x_2(x_3+q) \neq 0$.
On peut déterminer le signe de $f(x)$ comme dans le cas du système (Σ_3).

Remarquons que si $|q| > 1$ comme $x_3 = -q$ dans $\Delta_1^{-1}(0)$ et puisque $|x_3| \leq 1$, on trouve que $\{x_3 = -q\} \cap \mathrm{S}^2 = \emptyset$ et l'ensemble $\Delta_1^{-1}(0) = \{x_2 = 0\} \cap \mathrm{S}^2$ comme dans le cas du système (Σ_1). De plus on ne peut pas envisager une étude donnant une description des trajectoires extrémales sur toute la sphère de Bloch, elle va se restreindre sur une partie de S^2. Dans cet exemple, on va choisir les paramètres $a = -0.1$ et $b - c = 2$, (et donc $q = -0.05$), ce qui nous permettra dans la suite d'avoir une description des trajectoires sur toute la sphère de Bloch.

Pour le contrôle singulier on trouve

$$u_s(x) = \frac{2(c-b)x_1(a+(b-c)x_3)}{a+4(b-c)x_3}, \text{ avec } a+4(b-c)x_3 \neq 0.$$

On sait que u_s est dit admissible si $|u_s| < 1$.
La figure ci-dessous nous montre $|u_s| < 1$ pour les valeurs a, $b-c$ et q considérées avec $x_3 \neq \frac{a}{4(b-c)}$. On peut donc l'utiliser pour conduire une trajectoire singulière dans le lieu singulier.

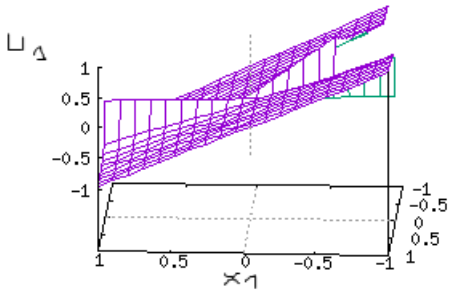

Figure 1.12: Le contrôle singulier.

Les lieux singuliers sont donnés par les fonctions $x_2 = \pm\sqrt{x_3^2 - 0.05x_3}$.

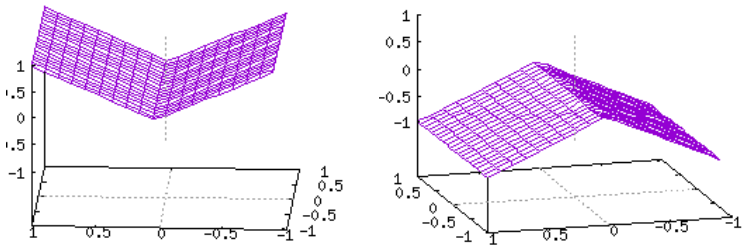

Figure 1.13: $x_2 = \pm\sqrt{x_3^2 - 0.05x_3}$

Pour le système (Σ_5) on présente une brève synthèse en temps minimal et surtout les types de trajectoires optimales qui peuvent se produire. En prenant les valeurs numériques $a = -0.1$ et $b-c = 2$ on a une description des trajectoires extrémales sur toute la sphère de Bloch. En effet, en considérant les domaines de commutation on donne quelques stratégies de commutations. On trouve, pour une trajectoire extrémale *bang* normale partant du point initial, les trajectoires optimales qui sont dans la concaténation de types *bang-bang* suivantes : x^-x^+, $x^-x^+x^-$ et *bang-singulier-bang* $x^-\mathrm{S}x^+x^-$, $x^-\mathrm{S}x^-x^+$ et $x^-\mathrm{S}x^+x^-x^+$ avec S représentant une trajectoire singulière. Par ailleurs, le pôle sud est atteint par une

trajectoire extrémale *bang-bang* x^-x^+. Une trajectoire extrémale *bang* anormale peut commuter soit sur l'ensemble $\{x_3 = 0.05\} \cap S^2$ soit sur $\{x_2 = 0\} \cap S^2$. Pour les commutations se produisant sur $\{x_3 = 0.05\} \cap S^2$ on trouve la trajectoire optimale *bang-bang* $x^-x^+x^-$ tandis que pour celles qui se produisent sur $\{x_2 = 0\} \cap S^2$ on obtient une trajectoire optimale de type $x^-x^+x^-x^+x^-$.

Nous donnons maintenant une conclusion sur les différentes synthèses numériques permettant l'analyse des trajectoires extrémales.

1.5.3 Conclusion et comparaison

L'objectif de l'analyse du système (Σ_1) à deux niveaux était de caractériser les synthèses en temps minimal correspondant aux différentes influences du paramètre de Coulomb sur une fréquence de transition donnée. Pour le système (Σ_3) à trois niveaux on a voulu regarder l'intérêt de faire évoluer l'état du système comme un système à deux niveaux et faire quelques comparaisons avec celui de deux niveaux. Une différence qu'on peut noter est quand on considère le paramètre de Coulomb plus grand que la fréquence de transition $(R > E_1^c - E_2^v)$; dans le cas du système (Σ_1) les trajectoires optimales ne sont que *bang-bang*, tandis que dans le cas du système (Σ_3) on trouve des trajectoires optimales de types *bang-bang* contenant une trajectoire singulière et le pôle sud est atteint par une trajectoire *bang*. La courbe du système (Σ_5) pour les valeurs numériques choisies présente presque la même allure que celle de (Σ_3) dans le cas où $(R > E_1^c - E_2^v$, c'est à dire $a = -1.93$ (Figure 5)). Mais celle de (Σ_5) ne passe pas par le pôle sud. Ainsi, la synthèse numérique de (Σ_5) se présente comme celle de (Σ_3) pour une trajectoire extrémale normale partant du point initial. Mais une différence notable est que le pôle sud pour le système (Σ_3) est atteint par une trajectoire extrémale *bang* x^- et pour le système (Σ_5) il est atteint par trajectoire extrémale *bang-bang* x^-x^+. Pour une extrémale anormale partant du point initial on obtient les mêmes types de trajectoires optimales *bang-bang* pour les commutations sur $(\{x_3 = 0.05\} \cap S^2$, pour $(\Sigma_5))$ et sur $(\{x_3 = 0\} \cap S_2$, pour (Σ_3) Figure 10). On note une différence claire pour les commutations sur $\{x_2 = 0\} \cap S_2$ ou sur $\{x_2 = 0\} \cap S^2$ des extrémales anormales des deux systèmes (Σ_3) et (Σ_5). Pour le système (Σ_3) on a une trajectoire optimale *bang-bang* de type x^-x^+ (Figure 11) et pour (Σ_5) on obtient une trajectoire de type $x^-x^+x^-x^+x^-$. Enfin, il est clair que pour le cas à deux niveaux la dynamique de (Σ_1)

est représentée par un système bilinéaire homogène qui dépend d'un seul paramètre de Coulomb mais pour les cas trois et quatre niveaux la dynamique de (Σ_3) et (Σ_5) est décrite par un système affine dont la partie non-linéaire représente les interactions de Coulomb ce qui complique l'étude de ces systèmes.

REFERENCES

[AS04] A. A. Agrachev and Y. L. Sachkov, Control theory from the geometric view-point, Encyclopaedia of Mathematical Sciences 87, Springer-Verlag, Berlin (2004).

[AA15] F. Albertini and D. D'Alessandro, Minimum time optimal synthesis for two level quantum systems, J. Math. Phys., 56:012 106, (2015).

[AA16] F Albertini and D. D'Alessandro, Time optimal simultaneous control of two-level quantum systems, Els. Aut., 74:55-62, (2016).

[Bel57] R. Bellman, Dynamic programming, Princeton, New Jersey, Princeton Univ. Press, (1957).

[BK14] B. Bidégaray-Fesquet and K. Keita, A nonlinear Bloch model for Coulomb interaction in quantum dots, J. Math. Phys., 55:021 501, (2014).

[BC05] U. Boscain and Y. Chitour, Time Optimal Synthesis for Left–Invariant Control Systems on SO(3), SIAM J. Control Optim., 44(1):111 139, (2005).

[BM05] U Boscain and P Mason, Time minimal trajectories for two-level quantum systems with drift, 44th IEEE Conference on Decision and Control, (2005).

[BM06] U. Boscain and P. Mason, Time minimal trajectories for a spin 1/2 particle in a magnetic field, J. Math. Phys., 47:062 101, (2006).

[BP04] U. Boscain and B. Piccoli, Optimal Synthesis for Control Systems on 2-D Manifolds, Springer, SMAI, 43, (2004).

[BSS20] U. Boscain, M. Sigalotti and D. Sugny, Introduction to the Foundations of Quantum Optimal Control, arXiv preprint arXiv:2010.09368, (2020).

[BMM12] E. Brüning, H. Mäkelä and A. Messina, Parameterizations of density matrices, J. of Modern, 59:1-20, (2012).

[BS03] P.W. Brumer and M. Shapiro, Principles of the quantum control of molecular processes, Wiley-Interscience, p. 250, 2003, (The 2nd edition was published in 2012).

[BS90] A.G. Butkovskiy and Y.I. Samoilenko, Control of quantum-mechanical processes and systems, Moscow, Nauka Publ, (In Russian), (1984). (English translation was published in 1990, Dordrecht, Kluwer Academic Publishers).

[CTP90] C. N. Cohen-Tannoudji and W. D. Phillips, New Mechanisms for Laser Cooling, Phys. Today, 43(10):33, (1990).

[Dup09] E. Dupuy, Croissance et spectroscopie de boîtes quantiques diluées d'InAs/InP (001) pour des applications nanophotoniques à 1, 55 μm, Ecole Centrale de Lyon Institut des Nanotechnologies de Lyon, (2009).

[EFZ19] R. EL Assoudi-Baikari, N. Forcadel and I.E. Zibo, Minimal time

synthesis for nonlinear Bloch model in quantum dots, Proceedings Book of the 2nd Mediterranean, p.78, (2019).

[FFW+99] A. Franceschetti, H. Fu, L.W. Wang and A. Zunger, Many-body pseudopotential theory of excitons in InP and CdSe quantum dots, Phys. Rev. B, 60(3):1819-1829, (1999).

[FWF+98] A. Franceschetti, L.W Wang, H. Fu and A Zunger, Short-range versus long-range electron-hole exchange interactions in semiconductor quantum dots, Phys. Rev. B, 58(20): 13367-13370, (1998).

[FZ97] A. Franceschetti and A. Zunger, Direct pseudopotential calculation of exciton coulomb and exchange energies in semiconductor quantum dots, Phys. Rev., letters, 78(5):915-918, (1997).

[FZ98] H. Fu and A. Zunger, Excitons in InP quantum dots, Phys. Rev. B, 57:24, (1998).

[GSS16] S.K Goyal, B.N Simon and R. Singh, Geometry of the generalized Bloch sphere for qutrits, J. Phys. A, 49:165 203, (2016).

[Gri12] F. Grillot, Contribution à l'étude de la dynamique des diodes lasers à nanostructures quantiques, Univ. Paris-II Denis Diderot, (2012).

[Ham19] K. Hamraoui, Contrôle quantique de la rotation moléculaire et de proces sus en Résonance Magnétique Nucléaire, Univ. de Bourgogne-Franche Comté, (2019).

[Hei26] W. Heisenberg, On the Relation between the Quantum Mechanics of Heisenberg, Born, Jordan, and that of Schrodinger, Annalen der Physik, 79(4):45–61, (1926).

[HE81] F. Hioe and T. Eberly, N-Level Coherence Vector and Higher Conservation Laws in Quantum Optics and Quantum Mechanics, Phys. Rev. Lett., 47:838, (1981).

[Hun09] R. Huneault, Time-optimal control of closed quantum systems, Univ. Waterloo, Ontario, Canada, (2009).

[Jea11] F. Jean, Géométrie différentielle et application au contrôle géométrique, Notes de cours de l'ENSTA-Paris, (2011).

[Jur97] V.Jurdjevic, Geometric Control Theory, Cambridge Univ. Press, 4:1322 233 233 124, (1997).

[KBG01] N. Khaneja, R. Brockett and S. J. Glaser, Time optimal control in spin systems, Phys. Rev. A, 63(1–13):131 429 45 50, (2001).

[KG01] N. Khaneja and S. J. Glaser, Cartan decomposition of su(2n) and control of spin systems, Chemical Phys., 267(1-3):112 313, June 2001.

[KG02] N. Khaneja and S. J. Glaser, Efficient transfer of coherence through ising spin chains, Phys. Rev. A, 66(6):060 301 13, (2002).

[KGB02] 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(3):032 301 13, Jan 2002.

[Kon08] C Kontz, Contrôle optimal de la dynamique dissipative de systèmes, Univ. Bourgogne, (2008).

[KSS89] I.V. Krasnov, N.Ya. Shaparev and I.M. Shkedov, Optimal laser actions, Novosibirsk, Nauka Publ, 1989 (In Russian), 93.

[KZ06] S. Kryszewski and M. Zachciał, Positivity of the N × N density matrix expressed in terms of polarization operators, J. Phys. A: Math., Gen, 39:5921, (2006).

[KKL16] P. Kurzyński, A. Kołodziejsk and W. Laskowski, Three-dimensional visualization of a qutrit, Phys. Rev. A, 93(6): 062 126, (2016).

[Lap11] M. Lapert, Développement de nouvelles techniques de contrôle optimal en dynamique quantique: de la Résonance Magnétique Nucléaire à la physique moléculaire, Univ. Bourgogne (2011).

[LAZ+13] M. Lapert, E. Assemat, Y. Zhang, S.J. Glaser and D. Sugny, Time-optimal control of spin 1/2 particles with dissipative and generalized radiation-damping effects, Phys. Rev. A, 87(4):043417, (2013).

[Let07] V.S. Letokhov, Laser control of atoms and molecules, New York, Oxford Univ. Press, p. 328, (2007).

[Mes99] A. Messiah, Quantum Mechanics, Dover Publications (1999).

[MP19] O.V. Morzhin and A.N. Pechen, Minimal time generation of density matrices for a two-level quantum system driven by coherent and incoherent controls-International, J. of Theoretical Phys., Springer, 60:576–584, (2021).

[NC00] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, Quantum computation and quantum information, Cambridge, U.K, New York, Cambridge Univ. Press (2000).

[Pan17] A. Pankratov, Propriétés des boites quantiques GaAs/AlGaAs obtenues par remplissage des nanotrous, UPMC (2017).

[Pic96] B. Piccol, Regular time-optimal syntheses for smooth planar systems Rend. Sem. Mat. Univ. Padova, (1996).

[PBG+62] L. S. Pontryagin, V. G. Boltyanskii, R. Gamkrelidze and E. F. Mishchenko, The Mathematical Theory of Optimal Processes, Wiley Interscience, 4:6106, (1962).

[RZ00] S.A. Rice and M. Zhao, Optical control of molecular dynamics, New York, Wiley, p. 456, (2000).

[Sie62] C.L. Siegel, Topics in Complex Function Theory I, Elliptic Functions and Uniformization Theory, Addison-Wesley, 1, (1962).

[Son98] E. D. Sontag, Mathematical Control Theory, Springer, 2nd edition, 4, (1998).

[SKJ07] D. Sugny, C. Kontz and H.R. Jauslin, Time-optimal control of a two-level dissipative quantum system, Phys. Rev. A, 6(2):023 419 (2007).

[Ton12] C. Tonin, Manipulation cohérente de l'émission résonnante d'une boîte

quantique unique, UPMC, (2012).
[WF01] A.J. Williamson and A. Franceschetti, Multi-excitons in self-assembled InAs/GaAs quantum dots, A pseudopotential, many-body approach, EPL Europhysics, 53(1):59–65 (2001) (2001).
[ZAF20] I. E. Zibo, R. El Assoudi-Baikari and N. Forcadel, Time Optimal Control of Nonlinear Bloch Equations, Montes Taurus J. of Pure and Applied Math., 2(2):49-57, (2020).
[Zri14] J. Zribi, Croissance et caractérisation des boites quantiques InAs/GaAs pour des applications photovoltaïques, Univ. Sherbrooke, (2014).

Chapter 2

Integrability of sub-Riemannian geodesic equations

We recall some basic notions concerning odd-contact homogeneous sub-Riemannian spaces and the geodesic equations. We give the complete classification for 4-dimensional odd-contact sub-Riemannian Lie groups and we present the adjoint geodesic equations. The results, concerning the existence of first integrals of the adjoint equations, and the fact the solutions of these equations are elliptic or not, are presented with proofs in Section 2.3.

2.1 Basic notions and notations

Some basic definitions and properties that will be used in ours proofs, concerning odd-contact homogeneous sub-Riemannian spaces and the geodesic equations are presented in this section.

Geodesic equations and sub-homogeneous spaces

For more details concerning sub-Riemannian geodesic equation, we refer to [19,23]. A sub-Riemannian manifold is a triple $(\mathrm{M},\mathscr{D},\mathscr{B})$, where M is an oriented smooth manifold of n-dimensional, $\mathscr{D}$ an oriented smooth vector field distribution of constant rank $k < n$, satisfying the Hörmander condition (i.e., all vector fields in $\mathscr{D}$ together with all Lie algebra brackets span the tangent space $\mathrm{T}_q\mathrm{M}$ at every point $q \in \mathrm{M}$), and $\mathscr{B}$ is a smoothly varying positive definite symmetric bilinear form on $\mathscr{D}$. We know [11,27] that every two points

in M can be joined by a curve that is almost everywhere tangent to $\mathscr{D}$, called a *horizontal curve*. For a horizontal curve $\gamma : [0,1] \to M$ we calculate its length $l(\gamma) = \int_0^1 \|\dot{\gamma}(t)\| dt$, ($\|\dot{\gamma}(t)\|^2 = \mathscr{B}(\dot{\gamma}(t), \dot{\gamma}(t))$) and this produces a sub-Riemannian distance on M defined to be the infimum of the lengths of all horizontal curves joining two points. A horizontal curve γ is called a *geodesic* if it realizes the minimum sub-Riemannian distance.

We choose a local orthonormal frame $\{X_1, \cdots, X_k\}$ of $\mathscr{D}$ and we consider each X_i as a fiber-linear function on T^*M. The Hamiltonian function, denoted by H, is given by $H = \frac{1}{2}(X_1^2 + \cdots + X_k^2)$, that is a fiber-quadratic function on T^*M. The Hamiltonian equation associated with H is called *geodesic equation*. The projections of its solutions onto M are sub-Riemannian geodesics called *normal geodesics*. In order to write down an explicit form of the geodesic equation, we use the Pontryagin Maximum Principle [26], which states that any normal geodesic $q : I \to M$ is the solution of a differential equation defined on the cotangent bundle T^*M of M. For a frame $\mathscr{D} = \{X_1, \cdots, X_k\}$ of the sub-Riemannian manifold given by k orthonormal vector fields any integral curve $q(t)$ of $\mathscr{D}$ satisfies

$$\dot{q}(t) = \sum_{i=1}^{k} u_i(t) X_i(q(t)), \qquad (1.1)$$

where $u_i(t), 1 \leq i \leq k$, are the *control* functions.

A geodesic is an integral curve of (1.1) that minimizes

$$\int_0^1 \sum_{i=1}^{k} u_i^2(t) dt\,.$$

We can thus define the Hamiltonian $\widehat{H} = < p, \sum_{i=1}^{k} X_i(q) u_i > -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k} u_i^2$ and then use the Pontryagin Maximum Principle to obtain the geodesic equation:

$$\dot{q}(t) = \frac{\partial H(q(t), p(t))}{\partial p} \quad \text{and} \quad \dot{p}(t) = -\frac{\partial H(q(t), p(t))}{\partial q}\,,$$

where H is the maximized Hamiltonian obtained after replacing the controls u_i by $< p, X_i(q) >$ in the Hamiltonian $\widehat{H}$. The functions $u_i = < p, X_i(q) >$, $1 \leq i \leq k$ are called *extremal controls*.

It is known [23] that for a contact distribution all geodesics are normal. Also, there

may exist length-minimizing horizontal curves that are not projections of solutions of the geodesic equation called *abnormal geodesics*.

Definition 1 *1) A sub-Riemannian isometry between two sub-Riemannian manifolds* $(M,\mathscr{D},\mathscr{B})$ *and* $(M',\mathscr{D}',\mathscr{B}')$ *is a diffeomorphism* $\psi : M \to M'$ *such that* $\psi_*(\mathscr{D}) = \mathscr{D}'$ *and* $\psi^*(\mathscr{B}') = \mathscr{B}$.
2) A sub-Riemannian homogeneous space (or sub-homogeneous space for short) is a sub-Riemannian manifold $(M,\mathscr{D},\mathscr{B})$ *which admits a group* G *of its sub-Riemannian isometries that is a Lie group acting smoothly and transitively on the manifold.*
3) A sub-Riemannian symmetric space (or sub-symmetric space for short) is a sub-homogeneous space $(M,\mathscr{D},\mathscr{B})$ *such that for every point* $q \in M$*, there exists a sub-Riemannian isometry* ψ *such that* $\psi(q) = q$ *and* $\psi_*|_{\mathscr{D}_q} = -\mathrm{Id}$ *(where* Id *is the identity).*

It is well known that a simply connected sub-homogenous space $(M,\mathscr{D},\mathscr{B})$ can be represented as the coset G/K, where G is the group of sub-Riemannian isometries of M, acting transitively on M, and K is the isotropic subgroup of G.

2.1.1 Odd-contact sub-Riemannian manifolds

Let $(M,\mathscr{D},\mathscr{B})$ be a 4-dimensional sub-Riemannian manifold with a distribution of rank 3. Consider the Levi form $\mathscr{L}$:

$$\mathscr{L} : \mathscr{D} \times \mathscr{D} \to TM/\mathscr{D}\,, \quad \mathscr{L}(X,Y) = [\tilde{X},\tilde{Y}] \pmod{\mathscr{D}}\,,$$

where $\tilde{X},\tilde{Y}$ are extensions to sections of $\mathscr{D}$. Since the Levi form $\mathscr{L}$ is a skew-symmetric bilinear form defined on a three-dimensional space, it has an at least one-dimensional kernel.

Definition 2 *The distribution* $\mathscr{D}$ *is odd-contact or quasi-contact if the dimension of the kernel of* $\mathscr{L}$ *is exactly one.*

Let $\tilde{\mathscr{D}}$ be the orthogonal complement to $\ker(\mathscr{L})$ in $\mathscr{D}$. Note that if M and $\mathscr{D}$ are oriented then $\mathscr{L}$ induces an orientation on $\tilde{\mathscr{D}}$ and an orientation on $\ker(\mathscr{L})$. The (normalised) odd-contact form is the one-form θ on M such that $\ker(\theta) = \mathscr{D}$. We have $d\theta|_{\tilde{\mathscr{D}}} = 2dV$ (volume form). Let $\hat{\mathscr{D}} = [\tilde{\mathscr{D}}, \tilde{\mathscr{D}}] \oplus \tilde{\mathscr{D}}$. Then $\dim(\hat{\mathscr{D}}) = 3$ and the skew-symmetric bilinear form $d\theta$ $\hat{\mathscr{D}} \times \hat{\mathscr{D}} \longrightarrow \mathbb{R}$ has a one-dimensional kernel transversal to $\tilde{\mathscr{D}}$. Then there exists an unique vector field ξ on M (called the *characteristic vector field*) which is in this kernel and such that $\theta(\xi) = 1$. Notice that the sub-Riemannian metric defined by $\mathscr{B}$ has a natural extension to a Riemannian metric on M by setting ξ to be orthonormal to $\mathscr{D}$. Also, in the odd-contact case if ψ is a (local) isometry between $(M, \mathscr{D}, \mathscr{B})$ and $(M', \mathscr{D}', \mathscr{B}')$ then we have $\psi^*\theta' = \pm\theta$, $\psi_* X_3 = \pm X_3$ and $\psi_*\xi = \pm\xi'$ and thus ψ will be a (local) Riemannian isometry relative to the extended Riemannian metric on M and M'.

The classification of contact sub-symmetric spaces G/K was done in [6,29]. Sub-homogenous spaces in dimension 3 and 4, where $\mathscr{D}$ is a contact or odd-contact distribution, respectively were studied by Falbel and Gorodski in [17] and the classification of odd-contact sub-symmetric spaces $(G, \mathscr{D}, \mathscr{B})$ was done. Here, we will complete this classification and will give one new class of odd-contact not sub-symmetric spaces.

2.1.2 Sub-Riemannian Lie groups and adjoint equations

Consider a sub-Riemannian manifold $(G, \mathscr{D}, \mathscr{B})$, where the manifold G is a n-dimensional Lie group, $\mathscr{D}$ is a right-invariant analytic distribution of constant rank $k < n$ (verifying the H*ö*rmander's condition) and $\mathscr{B}$ is a right-invariant symmetric positive definite bilinear form defined on $\mathscr{D}$. The triplet $(G, \mathscr{D}, \mathscr{B})$ is called a *sub-Riemannian Lie group.*

Definition 3 *A sub-Riemannian Lie algebra, is a triple* $(\mathfrak{g}, \mathfrak{p}, \mathfrak{B})$ *where* $\mathfrak{g}$ *is a real Lie algebra of dimension n,* $\mathfrak{p}$ *is a sub-vector space of* $\mathfrak{g}$ *of dimension* $k < n$ *which generates* $\mathfrak{g}$ *as Lie algebra, and* $\mathfrak{B}$ *is a symmetric definite and positive bilinear form on* $\mathfrak{p}$*. If* $\mathfrak{p}$ *is as an oriented linear subspace then the triplet* $(\mathfrak{g}, \mathfrak{p}, \mathfrak{B})$ *is called an oriented sub-Riemannian Lie algebra.*

To a sub-Riemannian Lie group $(G, \mathscr{D}, \mathscr{B})$, we associate a sub-Riemannian Lie algebra $(\mathfrak{g}, \mathfrak{p}, \mathfrak{B})$, defined by $\mathfrak{g} = T_eG$ the n-dimensional real Lie algebra of G (e is the identity of G), $\mathfrak{p}$ a linear subspace of $\mathfrak{g}$ of dimension smaller than $n-1$ given by $\mathfrak{p} = \mathscr{D}_e$ and $\mathfrak{B} = \mathscr{B}_e$ is a symmetric positive definite bilinear form on $\mathfrak{p}$ (defined as the restriction of $\mathscr{B}$ to $\mathscr{D}_e$). If we consider $\mathfrak{p} = \mathscr{D}_e$ as an oriented linear subspace (with its orientation deduced from $\mathscr{D}$), then $(\mathfrak{g}, \mathfrak{p}, \mathfrak{B})$ is an *oriented sub-Riemannian Lie algebra.*

Conversely let $(\mathfrak{g}, \mathfrak{p}, \mathfrak{B})$ be a sub-Riemannian Lie algebra. We consider the connected and simply connected Lie group G such that $T_eG = \mathfrak{g}$, $\mathscr{D}$ a right-invariant distribution on G such that $\mathscr{D}_e = \mathfrak{p}$ and $\mathscr{B}$ is the right-invariant symmetric positive definite bilinear form on $\mathscr{D}$ defined by $\mathscr{B}_e$=$\mathfrak{B}$. If we take $\mathfrak{p} = \mathscr{D}_e$ in $(\mathfrak{g}, \mathfrak{p}, \mathfrak{B})$ as an oriented linear subspace, then the orientation of $\mathscr{D}_e$ defines an orientation on the right-invariant distribution $\mathscr{D}$. The triplet $(G, \mathscr{D}, \mathscr{B})$ is the sub-Riemannian Lie group associated to $(\mathfrak{g}, \mathfrak{p}, \mathfrak{B})$.

Definition 4 *Tow (oriented) sub-Riemannian Lie algebras* $(\mathfrak{g}, \mathfrak{p}, \mathfrak{B})$ *and* $(\tilde{\mathfrak{g}}, \tilde{\mathfrak{p}}, \tilde{\mathfrak{B}})$ *are isomorphic if there exists an isomorphism* $\varphi : \mathfrak{g} \longrightarrow \tilde{\mathfrak{g}}$ *of Lie algebras such that: 1)* $\varphi(\mathfrak{p})$=$\tilde{\mathfrak{p}}$ *(and* φ *preserves the orientation).*
2) $\varphi_{|\mathfrak{p}}$ *satisfies* $\mathfrak{B}(x, y) = \tilde{\mathfrak{B}}(\varphi(x), \varphi(y))$ *for all* $x, y \in \mathfrak{p}$.

In the case of a sub-Riemannian Lie group, by identification of the space of left-invariant vector fields on G with the Lie algebra $\mathfrak{g}$, the Hamiltonian H becomes identified with a fiber-quadratic function on $\mathfrak{g}^*$ the dual of $\mathfrak{g}$. We know that $\mathfrak{g}^*$ carries a Poisson bracket defined, for any smooth functions f_1 and f_2 on $\mathfrak{g}^*$, by

$$\{f_1, f_2\}(\eta) = < \eta, [df_1, df_2](\eta) > \text{ for each } \quad \eta \in \mathfrak{g}^*.$$

Then, to the Hamiltonian H on $\mathfrak{g}^*$ considered as a Poisson manifold we associate a *Hamiltonian vector field* X_H on $\mathfrak{g}^*$ defined by $X_H(f) = \{f, H\}$, for each smooth function f on $\mathfrak{g}^*$. The differential equation defined on $\mathfrak{g}^*$ by X_H

$$\dot{p}(t) = X_H(p(t))$$

is called the *adjoint equation* of the sub-homogeneous space.

In order to write down the geodesic equation for a 4-dimensional odd-contact sub-homogeneous space, we consider its associated sub-Riemannian Lie algebra $(\mathfrak{g},\mathfrak{p},\mathfrak{B})$, and we take three orthonormal vector fields e_1, e_2 and e_3 spanning $\mathfrak{p}$ and e_3 centralizes e_1 and e_2. We set $e_4 = [e_1, e_2]$. The Lie algebra $\mathfrak{g}$ is generated by $\{e_1, e_2, e_3\}$, it is of dimension four. One can write $[e_i, e_4] = \sum_{k=1}^{4} c_{i4}^k e_k$, for some real constants c_{i4}^k. We use the basis $\{e_1, e_2, e_3\}$ to write down the equations of Pontryagin Maximum Principle.

Also, instead of the initial coordinates (q, p) on $\mathrm{T}^*\mathrm{G}$, we introduce new coordinates (q, h), where $h_i =< p, e_i >$, $1 \leq i \leq 4$. Then, we can express the maximized Hamiltonian, since the extremal controls are $u_i = h_i =< p, e_i >$ for $1 \leq i \leq 3$, as follows:

$$\mathrm{H} = \tfrac{1}{2}(< p, e_1 >^2 + < p, e_2 >^2 + < p, e_3 >^2) = \tfrac{1}{2}(h_1^2 + h_2^2 + h_3^2)$$

Its geodesic equation becomes $\dot{q} = h_1\mathrm{X}_1 + h_2\mathrm{X}_2 + h_3\mathrm{X}_3$ and $\dot{h}_i = \{h_i, \mathrm{H}\}$, for $1 \leq i \leq 4$. We verify that we have $\{h_i, h_j\} =< p, [\mathrm{X}_i, \mathrm{X}_j] >$, for any $i, j \in \{1,2,3,4\}$. Also, by using the properties of the Poisson bracket we obtain the following adjoint equations:

$$\begin{aligned}
\dot{h}_1 &= h_2\{h_1, h_2\} + h_3\{h_1, h_3\} \\
\dot{h}_2 &= h_1\{h_2, h_1\} + h_3\{h_2, h_3\} \\
\dot{h}_3 &= h_1\{h_3, h_1\} + h_2\{h_3, h_2\} \\
\dot{h}_4 &= h_1\{h_4, h_1\} + h_2\{h_4, h_2\} + h_3\{h_4, h_3\} \qquad (1.2)
\end{aligned}$$

2.2 Classification of 4-dimentional odd-contact sub-Riemannian Lie algebras

Throughout, we consider a simply connected sub-Riemannian Lie group $(\mathrm{G}, \mathscr{D}, \mathscr{B})$ of dimension 4 with an odd-contact distribution of rank 3 and its associated sub-Riemannian Lie algebra $(\mathfrak{g},\mathfrak{p},\mathfrak{B})$. Then, it is clear that $[\mathfrak{p},\mathfrak{p}] \not\subset \mathfrak{p}$ and we can write $\mathfrak{g} = \mathfrak{p} + [\mathfrak{p},\mathfrak{p}]$ which is obviously non abelian.

We give the complete classification of 4-dimensional sub-homogeneous spaces $(\mathrm{G}, \mathscr{D}, \mathscr{B})$, where $\mathscr{D}$ is odd-contact right-invariant 3 rank distribution.

Consider the associated sub-Riemannian Lie algebra $(\mathfrak{g},\mathfrak{p},\mathfrak{B})$, we have $\mathfrak{g}=\mathfrak{p}+[\mathfrak{p},\mathfrak{p}]$. We fix an orthonormal (direct) basis (e_1,e_2,e_3) in $\mathfrak{p}$ with e_3 central, that is $[e_1,e_3]=[e_2,e_3]=0$. Set $e_4=[e_1,e_2]$. Clearly, $\dim[\mathfrak{p},\mathfrak{p}]=1$, it is generated by e_4. The Jacobi identity gives that $[e_3,e_4]=0$. We have the following commutation relations:

$$\begin{aligned}
&[e_1,e_2]=e_4\\
&[e_4,e_1]=a_1e_1+a_2e_2+a_3e_3+a_4e_4\\
&[e_4,e_2]=b_1e_1+b_2e_2+b_3e_3+b_4e_4,\quad a_i,b_i\in\mathbb{R},\,1\le i\le 4\;with\,(*),\\
&[e_3,e_i]=0,\quad 1\le i\le 4. \qquad (2.1)\\
&\qquad (*)\;a_1b_4=a_4b_1\,,\;a_2b_4=a_4b_2\,,a_3b_4=a_4b_3\,,\;b_2=-a_1.
\end{aligned}$$

The condition $(*)$ is given by the Jacobi identities.

2.2.1 Classification of odd-contact sub-symmetric spaces

We know [17,29] that a sufficient but not necessary condition for a sub-homogeneous space to be symmetric is that $[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}]\subset\mathfrak{p}$. Falbel and Gorodski studied the case where $[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}]\subset\mathfrak{p}$ and they presented the classification of the sub-symmetric spaces. We recall briefly the result of this classification for more details, see [17].

Assume that $[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}]\subset\mathfrak{p}$. Therefore in (2.1) we have $a_4=b_4=0$ and the condition $(*)$ becomes $b_2=-a_1$. We obtain the commutation relations:

$$\begin{aligned}
&[e_1,e_2]=e_4\\
&[e_4,e_1]=a_1e_1+a_2e_2+a_3e_3\\
&[e_4,e_2]=b_1e_1+b_2e_2+b_3e_3\,,\quad a_i,b_i\in\mathbb{R},\,1\le i\le 3\,,\,b_2=-a_1\\
&[e_3,e_i]=0,\quad 1\le i\le 4. \qquad (2.2)
\end{aligned}$$

By using a rotation transformation one can assume that $a_1=0$ (and then $b_2=0$). Indeed, if $a_1\neq 0$, just make the rotation R of angle ϕ, in the plan (e_1,e_2) given by $\mathrm{R}e_i=\tilde{e}_i$, for $1\le i\le 4$, where $\tilde{e}_1=\cos\phi e_1+\sin\phi e_2$, $\tilde{e}_2=-\sin\phi e_1+\cos\phi e_2$, $\tilde{e}_3=e_3$ and $\tilde{e}_4=e_4$. Then we get the same commutation relations as (2.2) in the basis $(\tilde{e}_i)$, $1\le i\le 4$, with some constants $\tilde{a}_i$ and $\tilde{b}_i$. By simple calculation, we obtain these constants $\tilde{a}_i$ and $\tilde{b}_i$, for $1\le i\le 3$. In particular, we get $\tilde{a}_1=2a_1\cos(2\phi)+(a_2+b_1)\sin(2\phi)$ and we can choose the angle ϕ

such that $\tilde{a}_1 = 0$ ($\phi = -\frac{1}{2}\arctan(\frac{a_2+b_1}{2a_1})$) and then $\tilde{b}_2 = -\tilde{a}_1 = 0$. Therefore, we obtain the following commutation relations with real constants a, b, c and d, (Jacobi identity is evident):

$$\begin{aligned}
&[e_1, e_2] = e_4 \\
&[e_4, e_1] = ae_2 + be_3 \\
&[e_4, e_2] = de_1 + ce_3\,, \quad a, b, c, d \in \mathbb{R}\ with \\
&[e_3, e_i] = 0, \quad 1 \le i \le 4. \qquad (2.3)
\end{aligned}$$

(a, b, c, d) satisfies de following conditions $(**)$ given in [17]:

$$\begin{aligned}
(**)\ \ &b = c = 0\ and\ (a, d) \in \{(0,0), (-1,1), (1,-1), (1,0), (-1,0), (1,1)\}\,; \\
&a = d = c = 0\ \ and\ b < 0\ \ \ or\ \ \ b = d = 0,\ c > 0\ \ and\ \ a \neq 0.
\end{aligned}$$

Now we give the classification in the case where $[[\mathfrak{p}, \mathfrak{p}], \mathfrak{p}] \not\subset \mathfrak{p}$. This classification was not done in [17].

2.2.2 Classification of odd-contact not sub-symmetric spaces

Theorem 1 *Let* $(G, \mathscr{D}, \mathscr{B})$ *be a simply connected sub-homogeneous Lie group of dimension* 4 *with odd-contact right-invariant analytic distribution, which is not symmetric. Consider its associated Lie algebra* $(\mathfrak{g}, \mathfrak{p}, \mathfrak{V})$. *Then* $[[\mathfrak{p}, \mathfrak{p}], \mathfrak{p}] \not\subset \mathfrak{p}$ *and* $[[\mathfrak{p}, \mathfrak{p}], \mathfrak{p}] \not\subset [\mathfrak{p}, \mathfrak{p}]$.

Proof: Consider the associated sub-Riemannian Lie algebra $(\mathfrak{g}, \mathfrak{p}, \mathfrak{V})$. It satisfies $\mathfrak{g} = \mathfrak{p} + [\mathfrak{p}, \mathfrak{p}]$ and $\dim[\mathfrak{p}, \mathfrak{p}] = 1$. We clearly have $[[\mathfrak{p}, \mathfrak{p}], \mathfrak{p}] \not\subset \mathfrak{p}$, (otherwise the space is sub-symmetric). Then the subspace $\mathfrak{p}$ is not ad_{e_4}-invariant ($ad_{e_4}(x) = [e_4, x]$, for $x \in \mathfrak{g}$), that implies $(a_4, b_4) \neq (0,0)$ in the commutation relations (2.1).

Take (2.1) and make the following rotation R of angle ϕ, in the plan generated by e_1 and e_2, given by $Re_i = \hat{e}_i$, for $1 \le i \le 4$:

$$\hat{e}_1 = \cos\phi e_1 + \sin\phi e_2\,; \quad \hat{e}_2 = -\sin\phi e_1 + \cos\phi e_2\,; \quad \hat{e}_3 = e_3 \quad \text{and} \quad \hat{e}_4 = e_4.$$

We choose the angle ϕ as follows: $\cos\phi = \frac{a_4}{\sqrt{a_4^2+b_4^2}}$ and $\sin\phi = \frac{b_4}{\sqrt{a_4^2+b_4^2}}$.

By simple calculation and using the Jacobi identity condition $(**)$, we obtain the following commutation relations.

$$
\begin{aligned}
&[\hat{e}_1, \hat{e}_2] = \hat{e}_4 \\
&[\hat{e}_4, \hat{e}_1] = a\hat{e}_2 + b\hat{e}_3 + c\hat{e}_4\,, \quad a\,, b \in \mathbb{R}\,, \quad c > 0 \\
&[\hat{e}_4, \hat{e}_2] = 0 \\
&[\hat{e}_3, \hat{e}_i] = 0\,, \quad 1 \leq i \leq 4, \qquad\qquad (2.4)
\end{aligned}
$$

$$
where\ a = \tfrac{a_2 - b_1}{a_4^2 + b_4^2}\,, \quad b = \tfrac{a_3 a_4 + b_3 b_4}{\sqrt{a_4^2 + b_4^2}} \quad \text{and} \quad c = \sqrt{a_4^2 + b_4^2}.
$$

The Jacoby identity for (2.4) is evident and we have that $[[\mathfrak{p}, \mathfrak{p}], \mathfrak{p}]$ is generated by $a\hat{e}_2 + b\hat{e}_3 + c\hat{e}_4$ and then $\dim[[\mathfrak{p}, \mathfrak{p}], \mathfrak{p}] = 1$.

Let as denote by $G_{(a,b)}$, $a, b \in \mathbb{R}$, $(c > 0)$ the connected and simply connected sub-Riemannian Lie groups whose sub-Riemannian Lie algebras satisfy the commutation relations (2.4).

We get $[[\mathfrak{p}, \mathfrak{p}], \mathfrak{p}] \subset [\mathfrak{p}, \mathfrak{p}]$ if and only if $a = b = 0$. In this case the Lie algebra satisfying the commutation relations (2.4) is the direct sum of $\mathbb{R}$ with $\mathfrak{g}_1$, where $\mathfrak{g}_1$ is the 3-dimensional Lie algebra with a contact distribution generated by $\hat{e}_1$ and $\hat{e}_2$ with $[\hat{e}_1, \hat{e}_2] = \hat{e}_4$ satisfying the following non vanishing brackets:

$$
\begin{aligned}
&[\hat{e}_1, \hat{e}_2] = \hat{e}_4 \\
&[\hat{e}_4, \hat{e}_1] = c\hat{e}_4\,, \quad c > 0. \qquad\qquad (2.5)
\end{aligned}
$$

The simply connected Lie group of the Lie algebra $\mathfrak{g}_1$, is the universal covering of $SU(1,1)$ which is a contact sub-symmetric space. Then $G_{(0,0)}$ is the direct product of the universal covering of $SU(1,1)$ with $\mathbb{R}$, which is symmetric. We deduce that if $[[\mathfrak{p}, \mathfrak{p}], \mathfrak{p}] \subset [\mathfrak{p}, \mathfrak{p}]$ (i.e., $a = b = 0$) then we obtain $G_{(0,0)}$ which is sub-symmetric. This proves Theorem 1.

Now we present one new class of not sub-symmetric spaces given by $G_{(a,b)}$, with $(a, b) \neq (0, 0)$.

If $a \neq 0$ and $b = 0$ in (2.4) then we obtain:

$$
\begin{aligned}
&[\hat{e}_1, \hat{e}_2] = \hat{e}_4 \\
&[\hat{e}_4, \hat{e}_1] = a\hat{e}_2 + c\hat{e}_4, \quad a \neq 0\,, \quad c > 0. \qquad (2.6)
\end{aligned}
$$

The space $G_{(a,0)}$ corresponds to $G_1 \times \mathbb{R}$, where G_1 is a contact not symmetric space, that is a solvable group which generalizes the groups $SO(2) \rtimes\!\lhd \mathbb{R}^2$ or $SO(1,1) \rtimes\!\lhd \mathbb{R}^2$ (this depends on whether $a > 0$ or $a < 0$).

Assume that $b \neq 0$ and $a \in \mathbb{R}$. We can verify that the Lie algebra $\mathfrak{g}$, satisfying the commutation relations (2.4) is a real 4-dimensional solvable and not nilpotent Lie algebra. The Lie derivative algebra of $\mathfrak{g}$, $\mathfrak{D}(\mathfrak{g}) = [\mathfrak{g}, \mathfrak{g}]$ is generated by $\hat{e}_4$ and $a\hat{e}_2 + b\hat{e}_3$. Clearly, $\mathfrak{D}(\mathfrak{g})$ is an abelian tow dimensional Lie algebra. The centre $\mathfrak{C}(\mathfrak{g})$ of $\mathfrak{g}$ is generated by $\hat{e}_3$. We distinguish tow cases depending on the intersection of $\mathfrak{C}(\mathfrak{g})$ and $\mathfrak{D}(\mathfrak{g})$ as follows:

For $a = 0$, we obtain the following:

$$\begin{aligned} &[\hat{e}_1, \hat{e}_2] = \hat{e}_4 \\ &[\hat{e}_4, \hat{e}_1] = b\hat{e}_3 + c\hat{e}_4\,, \quad b \neq 0\,, \quad c > 0. \end{aligned} \tag{2.7}$$

In this case, we have $\mathfrak{C}(\mathfrak{g}) \cap \mathfrak{D}(\mathfrak{g}) = \mathfrak{C}(\mathfrak{g})$. Recall that $\mathfrak{g}$ is the the known Lie algebra denoted in the litterature by $\mathfrak{g}_{4,4}$ with vanishing parameter (see [25]) for the classification of 4-dimensional solvable Lie algebras).

For $a \neq 0$, we obtain the following:

$$\begin{aligned} &[\hat{e}_1, \hat{e}_2] = \hat{e}_4 \\ &[\hat{e}_4, \hat{e}_1] = a\hat{e}_2 + b\hat{e}_3 + c\hat{e}_4\,, \quad ab \neq 0\,, \quad c > 0. \end{aligned} \tag{2.8}$$

In this case $\mathfrak{C}(\mathfrak{g}) \cap \mathfrak{D}(\mathfrak{g}) = \{0\}$.

Notice that if $b \neq 0$ and $a = 0$ (resp. $a \neq 0$), then $\mathfrak{C}(\mathfrak{g}) \cap \mathfrak{D}(\mathfrak{g}) = \mathfrak{C}(\mathfrak{g})$ (resp. $\mathfrak{C}(\mathfrak{g}) \cap \mathfrak{D}(\mathfrak{g}) = \{0\}$). Therefore, the obtained sub-Riemannian Lie algebras are not isomorphic, because the center is invariant.

Also, observe that if $ab \neq 0$ then by the following linear basics transformation: $\tilde{e}_1 = \hat{e}_1$, $\tilde{e}_2 = \hat{e}_2 + \frac{b}{a}\hat{e}_3$, $\tilde{e}_3 = \hat{e}_3$ and $\tilde{e}_4 = \hat{e}_4$ we obtain the commutation relations (2.6). But this transformation is not a an isometry of sub-Riemannian Lie algebra, because the vectors $\tilde{e}_2$ and $\tilde{e}_3$ are not orthogonal.

2.2.3 Adjoint geodesic equations

We consider the adjoint equations for a 4-dimensional sub-homogenous space with an odd-contact distribution in the case when the subspace $\mathfrak{p}$ is ad_{e_4}-invariant or not ad_{e_4}-invariant.

We take the system of adjoint equations (1.2) given in Section 2.1 Since $[e_1,e_3]=[e_2,e_3]=0$ and $e_4=[e_1,e_2]$, we have $\{h_1,h_3\}=\{h_2,h_3\}=0$.

Notation: To simplify set $h_1=x$, $h_2=y$, $h_3=z$ and $h_4=w$.
Recall that the functions x, y and z are the extremal controls.

• Assume that $[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}]\subset\mathfrak{p}$. The associated Lie algebras verify the commutation relations (2.3). By a simple calculation we obtain the following quadratic system depending on the reel parameters a, b, c and d satisfying the condition $(**)$ of classification (see Section 2.2.1).

$$\dot{x}=yw,\quad \dot{y}=-xw,\quad \dot{z}=0 \text{ and}$$
$$\dot{w}=(a+d)xy+bzx+czy \quad a,b,c,d\in\mathbb{R},\ satisfying\ (**). \qquad (2.9)$$

• If $[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}]\not\subset\mathfrak{p}$, then the associated Lie algebras verify the commutation relations (2.4). We give the system of adjoint equations in the orthonormal basis $(\hat{e}_1,\hat{e}_2,\hat{e}_3)$ on $\mathfrak{p}$. We obtain:

$$\dot{x}=yw,\ \ \dot{y}=-xw,\quad \dot{z}=0 \text{ and}$$
$$\dot{w}=(ay+bz+cw)x,\quad a,b\in\mathbb{R},\ c>0. \qquad (2.10)$$

Notice that the constants a,b,c in System (2.9) and in System (2.10) are different. We use this notation in order to simplify.

2.3 Integrability of the adjoint equations

Theorem 2 [15] *Let* $(G,\mathscr{D},\mathscr{B})$ *be a 4-dimensional sub-Riemannian Lie group, where* $\mathscr{D}$ *is odd-contact right-invariant analytic distribution. If* $(G,\mathscr{D},\mathscr{B})$ *is sub-symmetric then*
1) *The system of adjoint equations admits exactly three quadratic functionally independent*

first integrals (Liouville-integrable).
2) *The solutions of the adjoint equation are elliptic functions.*

We will prove the following result.

Theorem 3 *Let* $(G,\mathscr{D},\mathscr{B})$ *be a 4-dimensional sub-Riemannian Lie group, where* $\mathscr{D}$ *is odd-contact right-invariant analytic distribution. If* $(G,\mathscr{D},\mathscr{B})$ *is not sub-symmetric then*
1) *The system of adjoint equations satisfies* (2.10) *with* $(a,b) \neq (0,0)$ *and it possesses exactly* **two** *quadratic functionally independent first integrals and*

if $a \neq 0$ *and* $b \in \mathbb{R}$ *an other polynomial functionally independent first integral exists for specific value of the parameters a and c;*

if $a = 0$ *and* $b \neq 0$ *an other logarithmic functionally independent first integral exists. But there is no other polynomial functionally independent first integral (the system is super-integrable).*
2) *The solutions of the adjoint equation are not* **all** *elliptic functions.*

We deduce the following main results using Theorem 2 and Theorem 3.

Corollary 1 *Let* $(G,\mathscr{D},\mathscr{B})$ *be a given 4-dimensional sub-Riemannian Lie group, where* $\mathscr{D}$ *is odd-contact right-invariant analytic distribution. The following three properties are equivalent:*
1) $(G,\mathscr{D},\mathscr{B})$ *is sub-symmetric.*
2) *The system of adjoint equations admits* **three** *quadratic functionally independent first integrals (Liouville-integrable).*
3) *The solutions of the adjoint equation are elliptic functions.*

Clearly, if $(G,\mathscr{D},\mathscr{B})$ is a 3-dimensional symmetric (resp. not symmetric) sub-Riemannian Lie group, where $\mathscr{D}$ is a contact distribution then the product $G \times \mathbb{R}$ is a symmetric (resp. not symmetric) 4-dimensional sub-Riemannian Lie group with an odd-contact distribution. The symmetric case corresponds either to $b = c = 0$ in $(**)$ and then in the cor-

responding adjoint equation (2.9), or to $a = b = 0$ in the adjoint equation (2.10). The not symmetric case corresponds to $(a,b) \neq (0,0)$ in the corresponding adjoint equation (2.10). Therefore, we deduce the following Corollary 2.

Corollary 2 *Let* $(\mathrm{G},\mathscr{D},\mathscr{B})$ *be a given 3-dimensional sub-Riemannian Lie group, where* $\mathscr{D}$ *is contact right-invariant analytic distribution. The following three properties are equivalent:*
1) $(\mathrm{G},\mathscr{D},\mathscr{B})$ *is symmetric.*
2) *The system of adjoint equations admits* **two** *quadratic functionally independent first integrals.*
3) *The solutions of the adjoint equation are elliptic functions.*

To prove Theorem 3, firstly we will study the integrability properties of System (2.10) and we will determine functionally independent first integrals for this system when they exist. Secondly, we will precise when the solutions of this systems (in particular, the extremal controls) are elliptic or not.

2.3.1 First integrals

Recall that a smooth function $\mathrm{F}:\ \mathrm{U} \to \mathbb{C}$ is a first integral for System (2.9) or (2.10) on an open set $\mathrm{U} \subset \mathbb{R}^4$ if $\frac{d\mathrm{F}}{dt} = \frac{\partial \mathrm{F}}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial \mathrm{F}}{\partial y}\dot{y} + \frac{\partial \mathrm{F}}{\partial z}\dot{z} + \frac{\partial \mathrm{F}}{\partial w}\dot{w} = 0$ on U. That means F is constant on the trajectories of this system.

We know that for these two systems (2.9) and (2.10) the maximized Hamiltonian is given by $\mathrm{H} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$. Also, since $\dot{z} = 0$, z is a constant function, we set $\mathrm{I}_0 = z$, a particular linear first integral and we will assume that $\mathrm{I}_0 = z$ is not a vanishing constant function. Clearly, $\mathrm{I}_1 = x^2 + y^2$ is a quadratic first integral which is functionally independent of I_0.

We can easily verify that for any real parameters a, b, c and d, (in particular satisfying the condition $(**)$ given by the classification in Subsection 2.2.1), System (2.9) admits a

quadratic first integral which is functionally independent of I_0 and I_1 given by:
$I_2 = (a+d)y^2 + w^2 - 2cxz + 2byz$.

For System (2.10), we give the following theorem that characterizes the existence of a first integral functionally independent of I_0 and I_1 depending in the parameters $a, b \in \mathbb{R}$ and $c \neq 0$. Its proof is more technical.

Theorem 4 *Consider System (2.10) with $a, b \in \mathbb{R}$ and $c \neq 0$:*

$$\dot{x} = yw, \quad \dot{y} = -xw, \quad \dot{z} = 0, \quad and \quad \dot{w} = (ay + bz + cw)x.$$

1) If $(a,b) = (0,0)$ then this system admits a quadratic first integral functionally independent of I_0 and I_1 given by: $I_2 = -c^2x^2 + w^2 + 2cyw$.
2) If $(a,b) \neq (0,0)$ then there is no quadratic first integral functionally independent of I_0 and I_1.
3) If $a \neq 0$ and $b \in \mathbb{R}$, then this system admits a polynomial first integral I_2 functionally independent of I_0 and I_1 for specific value of a, c. Namely, if $a = -2c^2$, then we get $I_2 = -4c^3y^3 - 6cbx^2z - \frac{3}{c}b^2z^2y + (3cy - \frac{3b}{2c}z)w^2 + w^3$.
4) If $a = 0$ and $b \in \mathbb{R}^*$, then there is no polynomial first integral functionally independent of I_0 and I_1. Also, this system admits a logarithmic first integral functionally independent of I_0 and I_1 given by: $I_2 = (bz + cw)^{-bz}e^{cw+c^2y}$.

Proof of Theorem 4

Consider System (2.10): $\dot{x} = yw, \dot{y} = -xw, \dot{z} = 0 \ \ and \ \dot{w} = (ay + bz + cw)x$.

• If $(a,b) = (0,0)$, one can verify easily that $I_2 = -c^2x^2 + w^2 + 2cyw$, is a quadratic first integral functionally independent of I_0 and I_1.

• Assume that $(a,b) \neq (0,0)$. Consider the rotational operator δ_1 and the operator δ given by:

$$\delta_1 = y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y} \ \ and \ \ \delta = w\delta_1 + (ay + bz + cw)x\frac{\partial}{\partial w}.$$

It is clear that if $\delta_1(f) = y\frac{\partial f}{\partial x} - x\frac{\partial f}{\partial y} = 0$, for a smooth function $f(x,y)$, then f is a function

of $I_1 = x^2 + y^2$.

A smooth function $F(x, y, z, w)$ is a first integral of System (2.10) if
$\delta(F) = w\delta_1(F) + (ay + bz + cw)x\frac{\partial F}{\partial w} = 0$.

Notice that if $\frac{\partial F}{\partial w} = 0$, then $\delta(F) = w\delta_1(F) = 0$. We can assume that $w \neq 0$ (because, if the function $w(t)$ is vanishing, then we obtain a stationary system). Then $\delta_1(F) = 0$ and thus F is a function of I_1 and I_0.

Therefore, we are interested in the case when $\frac{\partial F}{\partial w} \neq 0$. We consider F of the following form (polynomial in w of degree m with smooth functions as coefficients):

$$F(x, y, z, w) = \Sigma_{k=0}^{m} w^k F_k(x, y, z),$$

where $m \geq 1$ and the functions F_k, for $0 \leq k \leq m$, are smooth functions in the variables x, y, z. Clearly, the functions F_k are polynomial functions if and only if F is a polynomial function. One can verify that for every $k \geq 1$,

$$\delta(w^k F_k) = w^{k+1}\delta_1(F_k) + (ay + bz)xkw^{k-1}F_k + cxkw^k F_k$$

and then

$$\delta(F) = \Sigma_{k=0}^{m} w^{k+1}\delta_1(F_k) + (ay + bz)x\Sigma_{k=1}^{m} kw^{k-1}F_k + cx\Sigma_{k=1}^{m} kw^k F_k.$$

We can write $\delta(F) = \Sigma_{k=0}^{m+1} w^k \tilde{F}_k(x, y, z)$. Then $\delta(F) = 0$ is equivalent to $\tilde{F}_k = 0$, for every integer k, $0 \leq k \leq m+1$. Therefore, if $\delta(F) = 0$, we obtain the following equalities:

(i) $(ay + bz)xF_1 = 0$.

(ii) $\delta_1(F_k) + (k+1)cxF_{k+1} + (k+2)(ay + bz)xF_{k+2} = 0$, for $m \geq 2$, and for every integer k, $0 \leq k \leq m-2$.

(iii) $\delta_1(F_{m-1}) + mcxF_m = 0$ and $\delta_1(F_m) = 0$.

Remark 1 Observe that we can set $F_j = 0$ for $j \geq m+1$ and then we get Equality (ii) for every $k \geq 0$, in particular we get (iii) for $m-1 \leq k \leq m$.

In Equality (i) we can assume that $(ay+bz)x \neq 0$, because on can verify that if either $x=0$ or $ay+bz=0$, with $(a,b) \neq (0,0)$ then System (2.10) is stationary. Then we get $F_1 = 0$. Also, for $0 \leq m \leq 1$, we have $F = F_0$ and $\delta_1(F_0) = 0$, which implies that F is a function of I_0 and I_1.

Assume that $m \geq 2$. Since $F_1 = 0$ we get $\delta_1(F_1) = 0$, and then by Equality (ii) for $k = 0$, we obtain the following relation

$$(1)\ \ \delta_1(F_0) = -2(ay+bz)xF_2.$$

If $m = 2$, Equality (iii) gives that $\delta_1(F_1) = -2cxF_2$. Therefore, since $\delta_1(F_1) = 0$, $x \neq 0$ and $c \neq 0$, we have $F_2 = 0$ and then $F = F_0$. Equality (1) gives $\delta_1(F_0) = 0$ and then F is a function of I_0 and I_1.

Therefore, we deduce that if $(a,b) \neq (0,0)$, then there is no quadratic first integral functionally independent of I_0 and I_1 for this system. This proves the assertion (2) of the Theorem 4.

For $m \geq 3$, by using (ii) for $k = 1$ and since $\delta_1(F_1) = 0$ and $x \neq 0$, we obtain the following relation between the functions F_2 and F_3:

$$(2)\quad 2cF_2 + 3(ay+bz)F_3 = 0.$$

Just apply δ_1 to Equality (2) and use (ii) and Remark 1, and since $x \neq 0$ we get the following relation between the functions F_3, F_4 and F_5:

$$(3)\ \ (6c^2+3a)F_3 + 20c(ay+bz)F_4 + 15(ay+bz)^2F_5 = 0.$$

Similarly, by using the same reasoning, we obtain the following lemma:

Lemma 1 For every integer $k \geq 3$, there exists a relationship between the functions F_k, F_{k+1}, ..., F_{2k-1} of the form: $(k)\ \ \Sigma_{j=0}^{k-1}\alpha_{k+j}^{k}(ay+bz)^j F_{k+j} = 0$, where the constants α_{k+j}^{k} with $j = 0,1,...,k-1$ are polynomial functions on the parameters a and c with integer coefficients.

Also, if $a = 0$ (and $c \neq 0$) then $\alpha_k^k \neq 0$ for every $k \geq 3$.

Proof By recurrence, for $k=3$ the result is clearly given by Equality (3). Assume the result for k. By applying the operator δ_1 to Equality (k) and using (ii), Remark 1 and the fact that $\delta_1(ay+bz)=-ax$ and $x\neq 0$ we get a relation of the form:
$\alpha_{k+1}^{k+1}F_{k+1}+\alpha_{k+2}^{k+1}(ay+bz)F_{k+2}+...+\alpha_{2k+1}^{k+1}(ay+bz)^kF_{2k+1}=0$, where $\alpha_{k+1}^{k+1}=(k+1)c\alpha_k^k+a\alpha_{k+1}^k$. This proves Lemma 1.

Assume that there exists an integer $k\geq 3$, such that $\alpha_k^k=0$ (notice that by Lemma 1 we get $a\neq 0$) and assume that k is the smallest integer satisfying $\alpha_k^k=0$ (i.e., $\alpha_j^j\neq 0$ for every j, $3\leq j<k$). We can choose $m=k$, $F_m=1$ and $F_j=0$ for $j=k+1,...,2k-1$. Equality (k) $\alpha_m^mF_m=0$ is satisfied. Equality $(k-1)$ is given by $\alpha_{m-1}^{m-1}F_{m-1}+\alpha_m^{m-1}(ay+bz)F_m=0$ with $\alpha_{m-1}^{m-1}\neq 0$ and hence we obtain F_{m-1}. Notice that since $\alpha_k^k=kc\alpha_{k-1}^{k-1}+a\alpha_k^{k-1}$ $(k=m)$ we have $\alpha_m^{m-1}\neq 0$, otherwise $\alpha_{m-1}^{m-1}=0$ which is absurd. Similarly, using Equality $(k-i)$ we get F_{m-i} for $i=2,...,m-2$ and we get F_0 by (1).

To illustrate this we give two examples, for $b\in\mathbb{R}$:
If $\alpha_3^3=6c^2+3a=0$, $(a=-2c)$ we obtain

$$I_2=-4c^3y^3-6cbx^2z-\tfrac{3}{c}b^2z^2y+(3cy-\tfrac{3b}{2c}z)w^2+w^3.$$

If $\alpha_4^4=24c^3+32ac=0$, $(a=-\frac{3}{4}c^2)$ we obtain

$$I_2=-\tfrac{3}{a^2}(ay+bz)^4-\tfrac{6}{a}(ay+bz)^2w^2+\tfrac{4c}{a}(ay+bz)w^3+w^4.$$

I_2 is a polynomial first integral for System (2.10) functionally independent of I_0 and I_1. This proves the assertion (3).

Now, assume that $\alpha_k^k\neq 0$, for every integer $k\geq 3$ (Lemma 1). Set $m=k$ for some arbitrary integer k and set $F_j=0$ for every $j\geq m+1$. Then Equality (m) is of the form $\alpha_m^mF_m=0$ which implies that $F_m=0$ and then Equality $(m-1)$ is of the form $\alpha_{m-1}^{m-1}F_{m-1}+\alpha_m^{m-1}(ay+bz)F_m=0$, which gives that $F_{m-1}=0$. Successively we get by Equality $(m-i)$ that $F_{m-i}=0$ for $i=2,...,m-2$. Then $F=F_0$ which is a function of I_0 and I_1 because $\delta_1(F_0)=0$. Therefore, we deduce that if a denumerable polynomial functions on the parameters a and c, with integer coefficients, are nonzero ($\alpha_k^k\neq 0$, for every $k\geq 3$) then this system does not

admit a polynomial first integral functionally independent of I_0 and I_1.

To prove the assertion 4), let $a = 0$ and $b \neq 0$. Then by Lemma 1 we have $\alpha_k^k \neq 0$, for every $k \geq 3$. Therefore, the system does not admit a polynomial first integral functionally independent of I_0 and I_1.
But, one can easily verify that the following I_2 is a logarithmic first integral which is functionally independent of I_0 and I_1:

$$I_2 = (bz + cw)^{-bz} e^{cw + c^2 y}.$$

Notice that if $b = 0$, I_2 is a function of $I_3 = cw + c^2 y$ which is a first integral for System (2.10) with $(a, b) = (0, 0)$. This ends the proof of Theorem 4.

2.3.2 Solutions of adjoint geodesic equations

In the notation introduced above (Subsection 2.1.2), the extremal controls are $h_i = u_i$, for $1 \leq i \leq 3$, and we set $h_1 = x$, $h_2 = y$, $h_3 = z$ and $h_4 = w$ the solutions of (2.9) or (2.10). We first present some properties of elliptic functions that will be used in our proof.

Elliptic functions and second order differential equations

For more details concerning properties of elliptic functions, we refer to [13,28,30]. Here, we recall some specific properties of elliptic functions which are solutions of differential equations of order two with rational functions coefficients.

A generalization of elliptic functions consists in defining a class of functions, solutions of second order differential equations of the form

$$\ddot{s} = P(t, s)\dot{s}^2 + Q(t, s)\dot{s} + R(t, s),$$

where P, Q and R are rational functions of s and t and satisfy some conditions which are given in detail in [13]. The solutions share the fundamental property with elliptic functions that the only movable singularities are poles. The class of elliptic functions form a

subset of this class of functions. The complete list of second-order equations whose solutions verify the desired property that the only movable singularities are poles can be found in Appendix 1 in [13]. Two necessary conditions must be satisfied by P, Q and R in order that $s(t)$, solution of this second order differential equation, admits only poles as movable singularities. The first condition says that $P(t,s)$ must be either identically zero, or must have one of the five following forms:

$$\frac{m+1}{m(s-a_1)}+\frac{m-1}{m(s-a_2)},\ m\geq 1\ ;\ \frac{1}{2}\Sigma_{n=1}^{n=4}\frac{1}{s-a_n}\ ;\ \frac{2}{3}\Sigma_{n=1}^{n=3}\frac{1}{s-a_n}\ ;$$

$$\frac{1}{6}\Sigma_{n=1}^{n=3}\frac{n+2}{s-a_n}\ ;\ \frac{3}{4}(\frac{1}{s-a_1}+\frac{1}{s-a_2})+\frac{1}{2(s-a_3)}.$$

The quantities a_i are arbitrary functions of t. They are not necessarily different and one of them may be infinite.

The second condition says that Q and R must have the following form:
$Q(t,s)=\frac{a(t,s)}{c(t,s)}$ and $R(t,s)=\frac{b(t,s)}{c(t,s)}$, where $c(t,s)$, of degree m in s, is the least common denominator of the partial fractions in $P(t,s)$ and $a(t,s)$ and $b(t,s)$ are polynomials in s of degrees not exceeding $m+1$ and $m+3$ respectively.

But these two necessary conditions are not sufficient. Several authors gave a complete list of second-order equations whose solutions verify the desired property that the only movable singularities are poles [13]. Precisely, they showed that when $P(t,s)$ is non zero, by using linear fractional transformations, it must have a convenient canonical form (seven possibilities for $P(t,s)$ are listed in [13]). In particular, one can have $P(t,v)=\frac{1}{v}$ and for this case the all possibilities for Q and R are given in [13].

Elliptic and not elliptic extremal controls

Recall that for System (2.9) corresponding to sub-symmetric spaces:
$\dot{x}=yw$, $\dot{y}=-xw$, $\dot{z}=0$ and $\dot{w}=(a+d)xy+bxz+cyz$, where $a,b,c,d\in\mathbb{R}$ satisfying the condition $(**)$, it is proved that x, y and z are elliptic functions in [15] and then w is also an elliptic function. The proof uses some properties of elliptic functions which are solutions of differential equations of order two with constant coefficients and some properties

of the theory of inverse functions of elliptic integrals.

Consider System (2.10) with $a, b \in \mathbb{R}$ and $c \neq 0$,

$$\dot{x} = yw\,, \quad \dot{y} = -xw\,, \quad \dot{z} = 0, \quad \text{and} \quad \dot{w} = (ay + bz + cw)x\,.$$

Assume that $(a,b) \neq (0,0)$ that corresponds to not sub-symmetric spaces. We show that the solutions of System (2.10) are not all elliptic functions.

Consider the parametrization $x(t) = \sqrt{\mathrm{I}_1}\cos\theta(t)$ and $y(t) = \sqrt{\mathrm{I}_1}\sin\theta(t)$. We obtain $w(t) = -\dot{\theta}(t)$ which implies

$$\ddot{\theta} = \sqrt{\mathrm{I}_1}\cos\theta(-a\sqrt{\mathrm{I}_1}\sin\theta + bz + c\dot{\theta}).$$

We make a change of variables with $s = \tan(\frac{\theta}{2})$ so that $\cos(\theta) = \frac{1-s^2}{1+s^2}$, $\sin(\theta) = \frac{2s}{1+s^2}$ and $\dot{\theta} = \frac{2\dot{s}}{1+s^2}$. From a simple calculation we obtain the equation of second order

$$\ddot{s} = \frac{2s}{1+s^2}\dot{s}^2 + \frac{c\sqrt{\mathrm{I}_1}(1-s^2)}{1+s^2}\dot{s} + \frac{\frac{-1}{2}bz\sqrt{\mathrm{I}_1}(1-s^4) - a\mathrm{I}_1(1-s^2)s}{1+s^2}\,. \qquad (3.1)$$

Lemma 2 The solutions $s(t)$ of (3.1) are not elliptic for $(a,b) \neq (0,0)$.

Proof. To prove this lemma we use the properties of the solutions of the second-order differential equations given above.

In (3.1) $\mathrm{P}(t,s) = \frac{2s}{1+s^2} = \frac{1}{2}(\frac{1}{s-i} + \frac{1}{s-i} + \frac{1}{s+i} + \frac{1}{s+i})$ verifies the first condition.

Also, as $\mathrm{Q}(t,s) = \frac{c\sqrt{\mathrm{I}_1}(1-s^2)}{1+s^2}$ and $\mathrm{R}(t,s) = \frac{\frac{-1}{2}bz\sqrt{\mathrm{I}_1}(1-s^4)-a\mathrm{I}_1(1-s^2)s}{1+s^2}$,

the second condition is satisfied because the least common denominator of the partial fractions in $\mathrm{P}(t,s)$ is $1+s^2$, a polynomial of degree $m=2$ in s, the degrees of the numerators of $\mathrm{Q}(t,s)$ and $\mathrm{R}(t,s)$ are 2 and at most 4, respectively, not exceeding $m+1$ and $m+3$, respectively.

Since these two necessary conditions are not sufficient we make the linear fractional

transformation $v(t) = \frac{s(t)-i}{s(t)+i}$ and the equation (3.1) becomes

$$\ddot{v} = \frac{1}{v}\dot{v}^2 - \frac{c\sqrt{\mathrm{I}_1}}{2}(v + \frac{1}{v})\dot{v} - \frac{\mathrm{I}_1 a}{4}(v^3 - \frac{1}{v}) + \frac{i}{2}\sqrt{\mathrm{I}_1}bz(v^2+1). \qquad (3.2)$$

We easily verify that this equation is not included in this list [13] because $(a,b) \neq (0,0)$ and the constant $z \neq 0$. Then $v(t)$ does not verify the desired property. Therefore, $v(t)$ is not elliptic which clearly implies that $s(t)$ is not elliptic. This proves Lemma 2.

We deduce that x and y are not both elliptic. Because if x and y are both elliptic they necessarily have the same periods. So, as $s = \tan(\frac{\theta}{2}) = \frac{\sqrt{\mathrm{I}_1}-x}{y}$, we obtain that s is elliptic, as a quotient of elliptic functions with same periods, which is a contradiction. This ends the proof of Theorem 3.

Remark 2. If $a = b = 0$ Equation (3.2) becomes $\ddot{v} = \frac{1}{v}\dot{v}^2 - \frac{c\sqrt{\mathrm{I}_1}}{2}(v + \frac{1}{v})\dot{v}$. This equation is contained in the following equation (see [13], page 495, (14)):
$\ddot{v} = \frac{1}{v}\dot{v}^2 + (q(t)v + r(t)\frac{1}{v})\dot{v} + \dot{q}(t)v^2 - \dot{r}(t)$, when we take $q(t) = r(t) = \frac{-c\sqrt{\mathrm{I}_1}}{2}$. Therefore $v(t)$ is elliptic and then $s(t)$ is elliptic. We deduce that $x(t) = \sqrt{\mathrm{I}_1}\frac{1-s^2}{1+s^2}$ and $y(t) = \sqrt{\mathrm{I}_1}\frac{2s}{1+s^2}$ are elliptic functions.

2.4 Engel sub-homogeneous spaces

Let $(\mathrm{M}, \mathscr{D}, \mathscr{B})$ be a 4-dimensional sub-Riemannian space with $\mathscr{D}$ an Engel distribution. $\mathscr{D}$ is a rank 2 distribution and for every $q \in \mathrm{M}$ we have $dim(\mathscr{D}^2)_q = 3$ and $(\mathscr{D}^3)_q = \mathrm{T}_q\mathrm{M}$, where $\mathscr{D}^2 = [\mathscr{D}, \mathscr{D}]$ and $\mathscr{D}^3 = [\mathscr{D}, \mathscr{D}^2]$. Consider the Levi form $\mathscr{L}$

$$\mathscr{L} : \mathscr{D}^2 \times \mathscr{D}^2 \to \mathrm{TM}/\mathscr{D}^2, \quad \mathscr{L}(\mathrm{X}, \mathrm{Y}) = [\tilde{\mathrm{X}}, \tilde{\mathrm{Y}}] \pmod{\mathscr{D}2},$$

where $\tilde{\mathrm{X}}, \tilde{\mathrm{Y}}$ are extensions to sections of $\mathscr{D}^2$. Once we assume that $\mathscr{D}$ is an Engel distribution we have that $\mathscr{L}$ is a skew-symmetric bilinear form on $\mathscr{D}^2$, the kernel of $\mathscr{L}$ is one-dimensional and is contained in $\mathscr{D}$. We choose a unit vector field $\mathrm{X}_1 \in \mathscr{D}$, such that X_1 generates the kernel of $\mathscr{L}$ and we take X_2 a vector field on $\mathscr{D}$ such that $(\mathrm{X}_1, \mathrm{X}_2)$ is an orthonormal frame on $\mathscr{D}$. These spaces of Engel type are studied in ([3], [4]) and the classification of simply connected sub-Riemannian symmetric spaces is given in [3].

Theorem 5 *Let* $(M,\mathscr{D},g)$ *be a given 4-dimensional symmetric sub-Riemannian space with* $\mathscr{D}$ *an Engel distribution. Then*
1) *The system of adjoint equations admits exactly three quadratic functionally independent first integrals.*
2) *The solutions of the adjoint equation are elliptic functions.*

Proof It is known (for more details see [3]) that all simply connected symmetric sub-Riemannian spaces of Engel type are also odd-contact sub-symmetric spaces. Indeed, given a simply connected Engel sub-symmetric manifold $(M,\mathscr{D},\mathscr{B})$, we consider its associated sub-Riemannian Lie algebra $(\mathfrak{g},\mathfrak{p},\mathfrak{B})$. Since $\mathfrak{g}$ has an involutive structure, there is a canonical decomposition of $\mathfrak{g}$ into the ±1-eigenspaces of the involution, (1 on $[\mathfrak{p},\mathfrak{p}]$ and -1 on $\mathfrak{p}+[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}]$). We have $\mathfrak{g}=\mathfrak{p}+[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}]+[\mathfrak{p},\mathfrak{p}]$ and $\dim\mathfrak{p}+[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}]=3$.

Let $\mathfrak{p}'=\mathfrak{p}+[[\mathfrak{p},\mathfrak{p}],\mathfrak{p}]$ and $\mathfrak{B}'$ the restriction of the canonical metric defined on $\mathfrak{g}$ to $\mathfrak{p}'$. The triplet $(\mathfrak{g},\mathfrak{p}',\mathfrak{B}')$ corresponds to a simply connected symmetric space with an odd-contact distribution $(M,\mathscr{D}',\mathscr{B}')$, where M = G is the simply connected group with Lie algebra $\mathfrak{g}$, $\mathscr{D}'$ is a G-invariant distribution on G such that $\mathscr{D}'_e=\mathfrak{p}'$ (e is the identity of G) and $\mathscr{B}'$ is a G-invariant metric on $\mathscr{D}'$ such that $\mathscr{B}'_e=\mathfrak{B}'$.

Now, it is enough to take the orthonormal frame $\mathscr{D}=\{X_1,X_2\}$, the integral curve $q(t)$ of $\mathscr{D}$ is given by $\dot{q}(t)=u_1(t)X_1(q(t))+u_2(t)X_2(q(t))$, where $u_1(t)$ and $u_1(t)$ are the control functions. As in [3] we can choose a basis (e_1,e_2,e_3) of $\mathfrak{p}'$ such that e_3 centralizes e_1 and e_2. Then the system of the adjoint equations is contained in the sub-symmetric case with an odd-contact distribution. The proof of Theorem 5 follows from Theorem 2.

The study of the integrability of the adjoint equation on Engel not sub-symmetric spaces with is complicated , it will be studied in a future work.

Bibliography

[1] M. Adler and P. Van Moerbeke, *The algebraic integrability of geodesic flow on so(4)*, Invent. Math, 67 (1982), pp. 297-326.

[2] A. Agrachev, D. Barilari and U. Boscain, *A Comprehensive Introduction to sub-Riemannian Geometry*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, (2019).

[3] D.M. Almeida, *Sub-Riemannian symmetric spaces of Engel type*, *Mat. Contemp.* 17 (1999), pp. 45-57.

[4] D.M. Almeida, *Sub-Riemannian Homogeneous Spaces of Engel Type*, J. Dyn. Control Sys. 20, (2014), pp. 149-166.

[5] A. A. Ardentov and Yu. L. Sachkov, *Cut time in sub-Riemannian problem on Engel group*, ESAIM: Control, Optimization and Calculus of Variations, 21 (2015) pp. 958-988.

[6] P. Bieliavsky, E. Falbel and C. Gorodski, *The classification of simply-connected contact Sub-Riemannian symmetric spaces*, Pacific J. Math. (188) 1 (1999), pp. 65-82.

[7] U. Boscain and F. Rossi, *Invariant Carnot-Caratheodory metrics on* S^3*, SO(3), SL(2), and Lens space*, SIAM J. Control Optim. (47), 4, (2008), pp. 1851-1878.

[8] R. Brockett and L. Dai, *Nonholonomic kinematics and the role of elliptic functions in constructive controllability*, Nonholonomic Motion Planning (Z. Li and J. Canny, eds.), Kluwer, Boston, (1993), pp. 1-21.

[9] A. Bolsinov and J. Bao, *A note about integrable systems on low-dimensional Lie groups and Lie algebras*, Regular and Chaotic Dynamics, 24 (2019) 3, pp. 266-280.

[10] I.A. Bizyaev, A.V. Borisov, A.A. Kilin and I.S. Mamaev, *Integrability and nonintegrability of Sub-Riemannian geodesic flows on Carnot groups*, Regular and Chaotic Dynamics 21 (6) (2016), pp.759?774.

[11] W.L. Chow, *Über Systeme von linearen partiellen Differentialgleichungen erster Ordnung*, Math. Ann. 117 (1939), pp. 98-105.

[12] K. Dahamna, R. El Assoudi-Baikari, and W. Respondek, *Classification and integrability of the geodesic equation for two-step nilpotent sub-Riemannian Lie algebras in dimension 5 and 6*, Banach Center Publ. Nonlinear Control and Geometry Conference. Bedlewo, Poland, (2015).

[13] H.T. Davies, *Introduction to nonlinear differential equations and integral equations* , Dover Publications, New York, (1962).

[14] G. Duval, A. Maciejewski and W. Respondek, *Non-integrability of the optimal control problem for n-level quantum systems*, J. Phys. A 50, 17, (2017), p. 175202, 27.

[15] R. El Assoudi-Baikari and A. Gerber, *Optimal Control and Integrability on Lie Groups*, In Proceedings of the 10th IFAC. NOLCOS 2016, Monterey, California, USA. (49) 18 (2016), pp. 994-999

[16] R. El Assoudi-Baikari and I.E. Zibo, *Elliptic Optimal Control and Symmetric Sub-Riemannian Spaces*, Proceeding of the 24th International Symposium on Mathematical Theory of Networks and Systems (MTNS 2020) Cambridge, UK.

[17] E. Falbel and C. Gorodski, *Sub-Riemannian homogeneous spaces in dimensions 3 and 4*, Geom. Dedicata 62 (1996), pp. 227-252.

[18] V. Jurdjevic, *Hamiltonian point of view of non-euclidean geometry and elliptic functions*, Systems Control Lett. 43 (2001), pp. 25-41.

[19] V. Jurdjevic, *Integrable Hamiltonian Systems on Complex Lie Groups*, Cambridge Univ. Press, (1997).

[20] B. Kruglikov, *Examples of integrable sub-Riemannian geodesic flows*, J. Dyn. Control Syst. 8 (2002), pp. 323-340.

[21] A.P. Mashtakov and Yu.L. Sachkov, *Integrability of Left-Invariant Sub-Riemannian Structures on the Special Linear Group SL2(R)*, Differ. Uravn., vol. 50, no. 11, (2014),pp. 1541-1547.

[22] A.P. Mashtakov and Y. L. Sachkov, *Superintegrability of left-invariant sub-Riemannian structures on unimodular three-dimensional Lie Groups*, Differential Equations 51, (2015),1476-1483.

[23] R. Montgomery, *A tour of sub-Riemannian geometries, their geodesics and applications*, Amer. Math. Soc. (2002).

[24] R. Montgomery, M. Shapiro and A. Stolin, *A nonintegrable sub-Riemannian geodesic flow on a Carnot group*, J. Dyn. Control Syst. 3 (1997), pp. 519-530.

[25] A.L. Onishchik and E.B. Vinberg (ed.s), *Lie groups and Lie algebras III, Structure of Lie groups and Lie algebras*, Springer Berlin, (1994).

[26] L.S. Pontryagin, V.G. Boltyanskii, R.V. Gamkrelidze and E.F. Mishchenko, *The Mathematical Theory of Optimal Processes*, Interscience Publ. John Wiley, New York, (1962).

[27] P.K. Rashevsky, *Any two points of a totally nonholonomic space may be connected by an admissible line*, Usp. Zap. Ped. Inst. im. Liebknechta, Ser. Phys. Math. 2 (1938), pp. 83-94 (Russian). 15.

[28] C.L. Siegel, *Topics in Complex Function Theory I, Elliptic Functions and Uniformization Theory*, Addison-Wesley, 1 (1962).

[29] R.S. Strichartz, *Sub-Riemannian geometry*, J. Differential Geom. 24 (1986), pp. 221-263. Corrections: *Sub-Riemannian geometry*, J. Differential Geom. 30 (1989), pp. 595-596.

[30] E.T. Whittaker and G.N. Watson, *A Course of modern analysis*, 4^{th} Edition, Cambridge Univ. Press, New York, (1963).

Résumé

La première partie de la thèse étudie l'influence des énergies de Coulomb sur le transfert de population en temps minimal pour un système quantique correspondant à un modèle de Bloch avec interaction décrivant une boîte quantique. Après la modélisation de la dynamique de systèmes à deux, trois ou quatre niveaux d'énergie, on étudie le problème de contrôle en temps minimal. Des méthodes géométriques et numériques récemment développées pour une variété de dimension 2, basées sur le principe de maximum de Pontraygin permettent de caractériser les extrémales bang-bang et singulières et d'analyser le temps de transfert minimal suivant l'influence des paramètres de Coulomb sur la fréquence de transition.

Dans la seconde partie de la thèse, on étudie les propriétés d'intégrabilité des équations géodésiques pour des espaces sous-riemanniens homogènes de dimension 4 et on caractérise les solutions (les contrôles optimaux) qui sont elliptiques, et on établit le lien avec les espaces symétrique.

Abstract

The first part of the thesis relates to study the disruptive role of Coulomb energies during a population transfer in minimal time for a quantum system that corresponds to a Bloch model with interactions describing a quantum dot. After modeling of the dynamic systems at two, three or four energy levels one study the problem of minimal time optimal control for each system. Geometric and numerical methods recently developed on 2-dimensional manifolds based on the Pontraygin maximum principle allow to characterize bang-bang and singular extremal trajectories and to analyze the minimal transfer time according to the influence of Coulomb's interaction parameters on a transition frequency.

The second part of the thesis deals with integrability properties of geodesic equations on 4- dimensional sub-Riemannian homogeneous spaces. One characterizes the solutions of adjoint equations (optimal controls) which are elliptical and establishes the link with the symmetric spaces.