

Description et Contrôle des systèmes pour les technologies quantiques : des spins nucléaires aux atomes froids

Etienne Dionis

► To cite this version:

Etienne Dionis. Description et Contrôle des systèmes pour les technologies quantiques : des spins nucléaires aux atomes froids. Optique [physics.optics]. Université Bourgogne Franche-Comté, 2024. Français. NNT : 2024UBFCK039 . tel-04828573

HAL Id: tel-04828573 https://theses.hal.science/tel-04828573v1

Submitted on 10 Dec 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.





UNIVERSITÉ DE BOURGOGNE Ecole doctorale n°553 Carnot-Pasteur

Thèse

pour obtenir le grade de docteur en physique

présentée par

Etienne DIONIS

Description et contrôle de systèmes pour les technologies quantiques : des spins nucléaires aux atomes froids

soutenue à Dijon, le 24 octobre 2024 devant le jury composé de

Thomas CHAMBRION	Professeur	Président & Examinateur
Christiane KOCH	Professeur	Rapporteur
John MARTIN	Professeur	Rapporteur
Emmanuel TRÉLAT	Professeur	Examinateur
Dominique SUGNY	Professeur	Directeur de thèse

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

Résumé

Abstract (in English) : The thesis aims to apply optimal control theory to quantum physics experiments. In particular, two experiments at the Collisions - Aggregates -Reactivity Laboratory in Toulouse aim to manipulate Bose-Einstein condensates, and an experiment at the Walther-Meißner-Institut in Munich aims to set up quantum computers based on superconducting circuits. The goal is to bring the system to a specific state allowing the implementation of quantum computers, simulators or sensors. The systems are controlled respectively by the phase and/or amplitude of a laser and by an electric current. These controls must respect constraints dictated by the experimental setup. Thus, the objective of the thesis is to develop algorithms to numerically calculate the controls meeting the needs given above. These algorithms are based on those of GRAPE and the shooting method.

Keywords : Optimal control, Quantum control, GRAPE, Shooting method, Bose-Einstein Condensate (BEC), Fluxonium.

Résumé (en français) : Cette thèse a pour but l'application de la théorie du contrôle optimal à des expériences de physique quantique. Nous considérons deux expériences du Laboratoire de Collisions - Agrégats - Réactivité de Toulouse visant à manipuler des condensats de Bose-Einstein, et une expérience à l'Institut Walther-Meißner-Institut de Munich, qui a pour objectif de mettre en place des calculateurs quantiques basés sur des circuits supraconducteurs de type fluxonium. Le but est d'amener le système dans un état spécifique permettant la mise en place de calculateurs, simulateurs ou capteurs quantiques. Les systèmes sont contrôlés respectivement par la phase et/ou l'amplitude d'un laser dans un réseau optique et par un courant électrique. Ces contrôles doivent respecter des contraintes dictées par le dispositif expérimental. Ainsi, l'objectif de la thèse est de mettre au point des algorithmes pour calculer numériquement les contrôles répondant aux besoins décrits ci-dessus. Les algorithmes utilisés sont basés sur les méthodes GRAPE et de tir.

Mots-clés : Contrôle optimal, Contrôle quantique, GRAPE, Méthode de tir, Condensat de Bose-Einstein (BEC), Fluxonium.

Remerciements

Je tiens à exprimer toute ma gratitude aux personnes qui ont, de près ou de loin, contribué à l'aboutissement de cette thèse.

Avant tout, je remercie chaleureusement mon directeur de thèse, Dominique Sugny, pour son encadrement inestimable, sa disponibilité et sa passion contagieuse pour la transmission du savoir.

Je remercie également les membres du jury, Thomas Chambrion, Christiane Koch, John Martin et Emmanuel Trélat, d'avoir pris le temps de lire et de corriger mon travail, et d'être présents pour ma soutenance. Vos conseils, tant professionnels que scientifiques, ont été précieux pour mon parcours.

Je souhaite exprimer ma reconnaissance aux collègues du laboratoire LCAR de l'Université de Toulouse : David Guéry-Odelin, Bruno Peaudecerf, Juliette Billy, Alexandre Gauguet et Baptiste Allard, ainsi que tous les doctorants — Floriane, Nicolas, Nathan, Eloi, Dominique, Tangui, Léo et Selyan. Les collaborations avec les groupes « BEC » et « Interférométrie atomique » ont été pour moi une source d'inspiration et de plaisir. Merci également aux collègues de Munich, Klaus Liegener, Christian Schneider et Stefan Filipp, pour cette nouvelle collaboration prometteuse.

À mes collègues chercheurs du laboratoire ICB, en particulier les équipes DyTeQ et MARS, je vous suis reconnaissant pour votre soutien. Merci à mes amis doctorants et postdoctorants, Astghik, Benjamin, Colm, Gohar, Jing-Jun, Maria, Owen, Pierre, Quentin, Raef, Rodolphe, Siggi, Vardan et Xavier, dont la bonne humeur a été sans faille. Mention spéciale à Rodolphe et Maxime pour leur aide précieuse lors de la rédaction de ce manuscrit et la préparation de ma soutenance.

Je tiens également à remercier ceux qui m'ont soutenu humainement tout au long de cette aventure. À mes amis, Anthony, Nemo, Pierre, Quentin et Thomas, merci pour votre amitié indéfectible.

Je tiens à remercier chaleureusement le RAC Haltérophilie, ainsi que Jean-Michel, son président, pour leur accompagnement depuis 15 ans.

À mes grands-parents, Jean-Claude et Josette, pour leur générosité sans limites. Du fond du cœur, merci.

Mes parents, François et Nathalie, ont été présents au quotidien et dans chaque moment difficile. Votre soutien est inestimable.

À Alexandre et Audren, chez qui les week-ends en Normandie ont toujours été des moments de ressourcement.

Enfin, à Madison, ma compagne depuis six ans, pour ton soutien indéfectible. L'aventure dijonnaise se termine, et je me réjouis de poursuivre la prochaine à tes côtés.

Table des matières

1	Inti	roduction Générale	11
2	Des	cription du contrôle quantique	17
	2.1	Approche historique de la manipulation d'un système quantique à deux niveaux	18
		2.1.1 Rappel succinct de physique quantique	18
		2.1.2 Système quantique à deux niveaux en RMN	18
		2.1.3 Equations de Bloch	20
		2.1.4 Système à deux niveaux contrôlé par deux paramètres	21
		2.1.5 Système à deux niveaux contrôlé par un paramètre	22
	2.2	Théorie du contrôle	24
		2.2.1 Présentation d'un problème de contrôle	24
		2.2.2 Résolution d'un problème de contrôle optimal	25
		2.2.3 Application aux systèmes quantiques	28
	2.3	Résolution numérique d'un problème de contrôle optimal	29
		2.3.1 Méthode de tir	29
		2.3.2 GRAPE	32
		2.3.3 Bilan des deux méthodes	36
3	Pré	sentation et modélisation des expériences	39
	3.1	Condensat de Bose-Einstein	40
		3.1.1 Atomes froids	40
		3.1.2 Interféromètre atomique	48
	3.2	Fluxonium	53
4	Cor	ntrainte sur le contrôle	59
	4.1	Contrôle discret	60
		4.1.1 Version discrète du PMP	60
		4.1.2 Exemple du système à deux niveaux avec deux paramètres de contrôle	61
		4.1.3 Exemple du système à deux niveaux avec un paramètre de contrôle .	63
	4.2	Distorsion	67
		4.2.1 Présentation du problème	67
		4.2.2 Adaptation de GRAPE	69
		4.2.3 Adaptation de la méthode de tir	69
		4.2.4 Exemples	70
	4.3	Conclusion	75

ð	6)
U	2	۲	6
	L,		,

5	Gér	néralisation du problème de contrôle optimal d'un condensat de Bose-	
	Ein	stein	77
	5.1	Stabilisation stroboscopique	78
		5.1.1 Théorie de Floquet	78
		5.1.2 Utilisation du contrôle optimal pour la stabilisation stroboscopique .	79
	5.2	Contrôle optimal de portes quantiques	80
		5.2.1 Modélisation mathématique et contrôle optimal	80
		5.2.2 Exemple	83
	5.3	Contrôle de l'équation de Gross–Pitaevskii	84
		5.3.1 Modèle	84
		5.3.2 Résolution numérique	85
		5.3.3 Exemple	89
	5.4	Réseau optique 2D	91
		5.4.1 Avant-propos	91
		5.4.2 Modèle	91
		5.4.3 Problème de contrôle	94
		5.4.4 Exemple \ldots	95
	5.5	Conclusion	95
6	Inte	erférométrie atomique	97
	6.1	Avant-propos	98
	6.2	Théorie de Floquet	99
		6.2.1 Description des états de Floquet	99
		6.2.2 Caractérisation des états de Floquet 1	01
	6.3	Protocole de contrôle optimal robuste	05
	6.4	Présentation des résultats 1	.08
		6.4.1 Transfert par ingénierie de Floquet 1	.08
		6.4.2 Lien avec le transfert adiabatique	12
	6.5	Conclusion	12
7	Est	imation d'un paramètre 1	15
	7.1	Concepts	16
		7.1.1 Distance de Fubini	16
		7.1.2 Information de Fisher quantique	17
		7.1.3 PVM/POVM	.21
	7.2	Application du contrôle optimal	.23
		7.2.1 Contrôle de l'information de Fisher quantique	.23
		7.2.2 Contrôle de l'information de Fisher classique	25
	7.3	Estimation d'une force magnétique	26
		7.3.1 Maximisation de la QFI : cas d'un système BEC borné	27
		7.3.2 Maximisation de la QFI : cas d'un système BEC de dimension infinie 1	28
		7.3.3 Fingerprinting avec pondération	30
		7.3.4 Simulation d'un processus d'estimation	.30
	7.4	Conclusion	32

8	Conc	lusion

A Codes	139
Bibliographie	151

Introduction Générale

La physique quantique consiste en l'étude et la description de la matière à une échelle atomique [38]. Son développement, depuis les années 1920, a marqué une rupture technologique dans notre société [57]. Par exemple, l'ordinateur, outil devenu indispensable, utilise en abondance les transistors, composants électroniques à semi-conducteur, dont les propriétés sont expliquées par la physique quantique. Cette rupture technologique brusque apportée par la physique quantique est nommée première révolution quantique. Elle repose sur la compréhension et l'utilisation passive des systèmes quantiques. La deuxième révolution quantique [57], en cours actuellement, repose sur la mise au point des lasers dans les années 1960 et des circuits supraconducteurs dans les années 1980, qui ont offert la possibilité d'agir activement sur un système quantique afin d'exploiter les propriétés qui lui sont propres [152], ceci dans le but d'obtenir une meilleure compréhension de la physique et du développement de nouvelles technologies, dites quantiques, parmi lesquelles nous pouvons citer l'ordinateur quantique, les simulateurs quantiques ou encore les capteurs quantiques [2].

Afin de faciliter l'avancée et le développement des technologies quantiques, il est nécessaire de pouvoir sélectionner et manipuler précisément l'état dans lequel un système quantique doit se trouver, ce qui constitue le domaine du contrôle quantique [44]. Comme nous l'avons vu plus haut, il est possible de modifier l'état d'un système quantique par l'application d'un champ électromagnétique. En fonction du système considéré, cela peut être un champ électrique, un champs magnétique ou un laser. La modulation temporelle d'un tel champ est possible expérimentalement. Nous avons donc, à travers la modulation du champ, que l'on appelle contrôle, un moyen d'agir sur la dynamique d'un système quantique. La question qui se pose immédiatement est de savoir comment déterminer cette modulation pour atteindre l'objectif que l'on se fixe. La théorie du contrôle, branche des mathématiques, semble toute indiquée pour répondre à ces problèmes. Elle étudie l'évolution d'un système dynamique sous l'action d'un contrôle, un signal modulable temporellement. Elle prend racine dans les travaux de Maxwell pour répondre à des besoins sur le contrôle des machines à vapeur dans les années 1850 [111]. La théorie a connu une révolution pendant la guerre froide, avec le besoin de contrôler des véhicules aérospatiaux, notamment des missiles et des fusées [121, 139]. Le Principe du Maximum de Pontryagin [135] et le Principe de Programmation Dynamique [14] ont permis de trouver des solutions au problème consistant à amener un système dynamique d'un état initial à un état final, tout en minimisant un coût, typiquement le temps pour rejoindre l'état final.

La théorie du contrôle permet de répondre à plusieurs questions, dont une importante porte

sur le problème de contrôlabilité : est-ce que le système est contrôlable? Autrement dit, est-ce que l'on peut amener notre système d'un état initial à un état final en un temps donné fini à l'aide d'un contrôle [144]? Si oui, est-ce qu'il existe un contrôle qui permette ce changement d'état tout en minimisant un coût? On parle alors de problème de contrôle optimal [28, 144]. La solution d'un tel problème donne en général un contrôle en boucle ouverte, c'est-à-dire que le contrôle est calculé en amont à partir d'un modèle et est appliqué au système réel sans être corrigé par d'éventuelles mesures au cours de l'expérience. Un contrôle en boucle ouverte nécessite donc une connaissance très précise de la dynamique et des imprécisions expérimentales.

En revanche, un contrôle en boucle fermée permet de s'ajuster en temps réel à la dynamique du système par la mesure d'un écart du système par rapport à une trajectoire nominale ou à un état cible, du fait de variations éventuelles des paramètres expérimentaux. On parle alors de problème de stabilisation. L'exemple du contrôle d'une fusée illustre parfaitement cette démarche. En effet, la fusée, dont la trajectoire est modifiable par l'orientation des moteurs, doit atteindre une certaine orbite, une cible, à partir d'une position à la surface de la Terre. Premièrement, on peut se demander s'il est possible d'atteindre l'orbite définie. Si oui, quel est le contrôle qui permet de rejoindre cette orbite le plus vite possible. Il s'agit d'un problème en temps minimal. Une fois le contrôle trouvé et par conséquent une trajectoire nominale, il faut déterminer un contrôle qui puisse s'adapter en temps réel, à partir de mesures de l'état de la fusée, pour que celle-ci ne dévie pas de la trajectoire souhaitée du fait des imperfections expérimentales.

La manipulation expérimentale de systèmes quantiques peut s'avérer être un défi pour plusieurs raisons [99]. D'un point de vue fondamental, une difficulté réside dans la mesure d'un système quantique. En effet, en vertu du postulat de la réduction du paquet d'onde, mesurer un système quantique implique la modification de sa dynamique. Plus précisément, le résultat de la mesure réduit instantanément cet état superposé à l'un des états propres de l'observable mesurée. Il semble alors difficile, à l'instar d'un système classique, de réaliser un contrôle en boucle fermée. Notons que pour certaines expériences, un contrôle en boucle fermée est envisageable dans le cas où la mesure est effectuée sur un système sonde intriqué avec le système d'intérêt [56]. Nous ne considérerons ici que le cas où la mesure est effectuée directement sur le système d'intérêt. L'incapacité à effectuer des mesures intermédiaires exige une connaissance précise des paramètres expérimentaux ou un contrôle capable de répondre aux objectifs, quelle que soit la valeur d'un paramètre dans un intervalle de confiance. Dans le premier cas, le contrôle optimal est utilisé pour minimiser l'incertitude sur la valeur d'un paramètre lors d'expériences dédiées. Dans le second cas, le contrôle est qualifié de robuste par rapport au paramètre considéré. D'un point de vue expérimental, l'une des difficultés réside dans la brièveté des expériences. En effet, pour préserver le comportement quantique et éviter la décohérence, il est impératif d'isoler autant que possible le système de son environnement externe. Les temps de contrôle sont ainsi de l'ordre de la nanoseconde ou de la microseconde, selon l'expérience considérée. Dans ce contexte, il est essentiel de modéliser le contrôle tel qu'il est appliqué par le dispositif électronique, généralement sous forme d'impulsions constantes par morceaux avec un pas de temps fixé, et dont la valeur peut ne pas être négligeable par rapport au temps total de l'expérience. Il est également important de veiller à éviter des variations trop brusques dans le contrôle, qui seraient impossibles à générer par l'électronique. D'un point de vue numérique, la principale difficulté est liée au fait que la plupart des systèmes quantiques étudiés sont de très grandes dimensions. Toutes les méthodes de résolution d'un problème de contrôle optimal ne sont donc pas applicables,

12

ce qui implique l'utilisation d'algorithmes spécifiques pour simuler et optimiser la dynamique des systèmes.

Cette thèse a pour but d'utiliser la théorie du contrôle afin de répondre aux exigences des expériences de physique quantique. En particulier, nous avons travaillé avec trois groupes expérimentaux.

Deux expériences portent sur la manipulation de condensats de Bose-Einstein (BEC) à l'université de Toulouse au Laboratoire de Collisions - Agrégats - Réactivité :

- l'équipe « BEC » supervisée par Pr D. Guéry-Odelin et Dr Bruno Peaudecerf portant sur la simulation quantique,
- l'équipe « interférométrie atomique » sous la supervision de Dr Alexandre Gauguet et Dr Baptiste Allard qui étudie la métrologie basée sur l'interférométrie atomique à large transfert d'impulsion.

La troisième expérience supervisée par Dr Klaus Liegener et Dr Christian Schneider à l'Institut Walther-Meißner-Institut de Munich dans le groupe de Pr Stefan Filipp, propose la mise en place de calculateurs quantiques reposant sur des qubits fluxonium, un type de qubit supraconducteur.

Le manuscrit est divisé en six chapitres.

Les deux premiers chapitres présentent les concepts et modèles utilisés dans le reste du manuscrit. Le chapitre 2 introduit le concept de problème de contrôle optimal ainsi que sa résolution numérique, notamment par les algorithmes de la méthode de tir et GRAPE. L'exemple du système à deux niveaux est utilisé pour illustrer l'utilité du contrôle optimal dans la manipulation de systèmes quantiques. Le chapitre 3 introduit en détail les modèles théoriques des trois expériences sur lesquelles nous avons travaillé.

Le chapitre quatre est consacré à la résolution de problèmes où le contrôle est constant par morceaux. Dans un premier temps, nous étudions l'influence de la durée d'échantillonnage sur le temps minimum pour le cas de systèmes à deux niveaux, à l'aide d'une version généralisée du principe du maximum de Pontryagin. Dans un deuxième temps, nous étudions la prise en compte d'un retard sur le contrôle dû au dispositif électronique de mise en forme. Le signal perçu par le système n'est alors pas celui calculé numériquement, et la cible risque de ne pas être atteinte. Nous étudions également l'effet du retard sur le temps minimum pour un système à deux niveaux, ainsi que dans le cadre du fluxonium.

Le chapitre cinq est dédié à la manipulation d'un condensat de Bose-Einstein pour des expériences d'atomes froids. Quatre études sont présentées. Premièrement, le maintien stroboscopique du système sur un état spécifique est étudié. Il s'agit de trouver un contrôle qui permette d'atteindre périodiquement cet état. La théorie de Floquet est utilisée pour formaliser ce type de stabilisation. Deuxièmement, l'implémentation de portes quantiques qui permet le calcul quantique est présentée. Troisièmement, la prise en compte de l'interaction entre les atomes du condensat est explorée. Quatrièmement, nous détaillons l'extension du contrôle d'un condensat dans un réseau 1D à un réseau 2D.

Le chapitre six présente l'utilisation du contrôle optimal pour la mise en place d'un interféromètre atomique à large transfert d'impulsion. Une des étapes dans la construction d'un interféromètre consiste à accélérer un paquet d'onde. Nous montrons qu'il est alors possible de transférer successivement le paquet d'onde sur des états d'impulsions d'ordre supérieur en utilisant la théorie de Floquet dans un référentiel adéquat. Le contrôle optimal est utilisé pour réaliser les transferts. Par ailleurs, le contrôle doit être robuste par rapport à la dispersion en vitesse initiale des atomes constituant le paquet d'onde. Le chapitre sept présente l'utilisation du contrôle optimal pour l'estimation d'un paramètre expérimental. Le formalisme de l'information de Fisher classique et quantique est présenté. Il permet de mettre en place des stratégies de contrôle pour minimiser l'incertitude sur la valeur d'un paramètre de l'Hamiltonien modélisant le système. Le lien avec l'estimation de paramètre par interférométrie est exposé. Ces résultats théoriques et numériques sont utilisés pour l'estimation d'une force magnétique ajoutée dans l'expérience « BEC ».

Cette thèse a donné lieu à la publication des articles suivants :

 E. Dionis and D. Sugny, Sequential versus Concurrent gradient-based optimal algorithms for the robust control of quantum systems, Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 55, 84006 (2022) [54]

RÉSUMÉ : Nous étudions deux formulations différentes d'algorithmes basés sur la méthode des gradients pour le contrôle robuste des systèmes quantiques. Nous considérons le contrôle simultané d'un ensemble de systèmes qui diffèrent par la valeur d'un paramètre Hamiltonien constant. Les deux versions de l'algorithme itératif, appelées respectivement concurrente et séquentielle, correspondent à une mise à jour conjointe du contrôle à chaque itération pour tous les éléments de l'ensemble ou à une correction successive du contrôle dans laquelle la loi de contrôle est différente pour chaque système. Nous analysons l'efficacité relative des deux procédures d'optimisation sur deux exemples de référence, à savoir le contrôle de systèmes quantiques à deux niveaux et des condensats de Bose-Einstein dans un réseau optique unidimensionnel. Des simulations numériques intensives montrent la supériorité de la formulation de mise à jour séquentielle par rapport à la formulation concurrente pour un coût numérique similaire.

- E. Dionis and D. Sugny, Time-optimal control of two-level quantum systems by piecewise constant pulses, *Physical Review A* 107, 032613 (2023) [55]
 RÉSUMÉ : Nous appliquons une extension du principe du maximum de Pontryagin pour dériver des commandes temporelles optimales pour des systèmes quantiques à deux niveaux à l'aide d'impulsions constantes par morceaux. Des solutions optimales globales sont obtenues pour le transfert d'état à l'aide d'une ou deux commandes. Des limites exactes de vitesse quantique sont établies en fonction de la période d'échantillonnage. Nous observons numériquement une convergence exponentielle vers le temps minimum dans la limite continue lorsque cette période tend vers zéro. Nous montrons que cette convergence est seulement polynomiale pour un système quantique linéarisé. Nous discutons de l'impact expérimental de ce résultat.
- F. Arrouas, N. Ombredane, L. Gabardos, E. Dionis, N. Dupont, J. Billy, B. Peaudecerf, D. Sugny and D. Guéry-Odelin, Floquet operator engineering for quantum state stroboscopic stabilization, Comptes Rendus. Physique 24, 173-185 (2023) [8]
 RÉSUMÉ : Le contrôle optimal est un outil précieux pour la simulation quantique, permettant la préparation, la manipulation et la mesure optimisées des états quantiques. En optimisant un paramètre de contrôle dépendant du temps, des états cibles peuvent être préparés pour initialiser ou façonner des dynamiques quantiques spécifiques. Dans ce travail, nous nous concentrons sur la conception d'une évolution unitaire conduisant à la stabilisation stroboscopique d'états quantiques d'un condensat de Bose-Einstein dans un réseau optique. Nous montrons comment, pour des états présentant des symétries spatiales et temporelles, une telle évolution peut être dérivée à partir des contrôles de préparation initiale des états; tandis que pour un état cible général, nous utilisons

le contrôle quantique optimal pour générer directement un opérateur de Floquet stabilisant. Les optimisations numériques mettent en évidence l'existence d'une vitesse quantique limite pour ce processus de stabilisation, et nos résultats expérimentaux démontrent la stabilisation efficace d'une large gamme d'états quantiques dans le réseau.

- Q. Ansel, E. Dionis and D. Sugny, **Optimal Control Strategies for Parameter Estimation of Quantum Systems**, *SciPost Physics* 16, 013 (2024) [6] RÉSUMÉ : La théorie du contrôle optimal est un outil efficace pour améliorer l'estimation des paramètres des systèmes quantiques. Différentes méthodes peuvent être utilisées pour concevoir le protocole de contrôle. Elles peuvent être basées soit sur la maximisation de l'information de Fisher quantique (QFI), soit sur des processus de contrôle sélectif. Nous décrivons les similitudes, les différences et les avantages de ces deux approches. Une étude comparative détaillée est présentée pour estimer les paramètres d'un système de spin- $\frac{1}{2}$ couplé à un bain bosonique. Nous montrons que les mécanismes de contrôle sont généralement équivalents, sauf lorsque la décohérence n'est pas négligeable ou lorsque la configuration expérimentale n'est pas adaptée à la QFI. Dans ce dernier cas, la précision obtenue avec les contrôles sélectifs peut être de plusieurs ordres de grandeur meilleure que celle donnée par la QFI.
- Q. Ansel, E. Dionis, F. Arrouas, B. Peaudecerf, S. Guérin, D. Guéry-Odelin and D. Sugny, Introduction to Theoretical and Experimental aspects of Quantum Optimal Control, Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 57, 133001 (2024) [5]

RÉSUMÉ : Le contrôle optimal quantique est un ensemble de méthodes permettant de concevoir des champs électromagnétiques variant dans le temps pour effectuer des opérations dans les technologies quantiques. Ce tutoriel présente les éléments de base de cette théorie basée sur le principe du maximum de Pontryagin, de manière accessible aux physiciens. Une analogie avec la mécanique Lagrangienne et Hamiltonienne classique est proposée pour présenter les principaux résultats utilisés dans ce domaine. L'accent est mis sur les différents algorithmes numériques pour résoudre un problème de contrôle optimal quantique. Plusieurs exemples allant du contrôle de systèmes quantiques à deux niveaux à celui des condensats de Bose-Einstein (BEC) dans un réseau optique unidimensionnel sont étudiés en détail, en utilisant à la fois des méthodes analytiques et numériques. Des codes basés sur la méthode de tir et des algorithmes basés sur la méthode des gradients sont fournis. La connexion entre les processus optimaux et la vitesse quantique limite est également discutée dans le cas des systèmes quantiques à deux niveaux. Dans le cas du BEC, la mise en œuvre expérimentale des protocoles de contrôle optimal est décrite, tant pour les cas à deux niveaux que pour les cas à plusieurs niveaux, avec les contraintes et limitations actuelles de ces plateformes. Cette présentation est illustrée par les résultats expérimentaux correspondants.

— T. Rodzinka, E. Dionis, L. Calmels, S. Beldjoudi, A. Béguin, D. Guéry-Odelin, B. Allard, D. Sugny, and A. Gauguet, Floquet-acceleration for Large-Scale Atom Interferometers, accepté par Nature Comm. (2024) [130]

RÉSUMÉ : Le contrôle efficace de la cohérence atomique avec des atomes froids a fait des interféromètres atomiques un outil essentiel pour les capteurs quantiques et les mesures de précision. Les performances de ces interféromètres sont étroitement liées à la production de grandes séparations de paquets d'onde. Nous présentons ici une nouvelle approche pour les diviseurs de faisceaux atomiques basée sur la stabilisation stroboscopique des états quantiques dans un réseau optique accéléré. L'état de Floquet correspondant est généré par des protocoles de théorie du contrôle optimal. De cette manière, nous concevons un interféromètre à large transfert de moment (LMT), avec une séparation en impulsion de 600 reculs de photons (600 $\hbar k$) entre ses deux bras. Chaque diviseur de faisceau LMT est réalisé en un temps particulièrement court (2 ms) et se révèle remarquablement robuste contre la dispersion initiale de la vitesse du paquet d'ondes et les fluctuations de profondeur de réseau. Notre étude montre que l'ingénierie de Floquet est un outil prometteur pour explorer les nouvelles frontières de l'interférométrie atomique.

Description du contrôle quantique

2

Résumé : Le contrôle quantique [2, 11, 100, 102, 127, 129, 136] peut être considéré comme l'intersection de la théorie du contrôle, de la mécanique quantique et de l'analyse numérique. Ainsi, afin d'appréhender au mieux la lecture du manuscrit, il est judicieux de définir chacun de ces trois domaines. Ce chapitre introduit le contrôle quantique à travers l'exemple d'un système quantique à deux niveaux. L'objectif est double : présenter le système quantique à deux niveaux et montrer les possibilités qu'offre la théorie du contrôle pour le manipuler. Deux algorithmes de résolution d'un problème de contrôle sont détaillés.

Appro	che historique de la manipulation d'un système quantique à deux niveaux	18
2.1.1	Rappel succinct de physique quantique	18
2.1.2	Système quantique à deux niveaux en RMN	18
2.1.3	Equations de Bloch	20
2.1.4	Système à deux niveaux contrôlé par deux paramètres	21
2.1.5	Système à deux niveaux contrôlé par un paramètre	22
	Description du système	22
	Présentation des oscillations de Rabi	22
Théori	ie du contrôle	24
2.2.1	Présentation d'un problème de contrôle	24
2.2.2	Résolution d'un problème de contrôle optimal	25
2.2.3	Application aux systèmes quantiques	28
Résolu	tion numérique d'un problème de contrôle optimal	29
2.3.1	Méthode de tir	29
	Présentation de la méthode	29
	Exemples	30
2.3.2	GRAPE	32
	Méthode des matrices auxiliaires	34
	Méthode du Split operator	35
	Méthode basée sur le PMP	36
2.3.3	Bilan des deux méthodes	36
	Appro 2.1.1 2.1.2 2.1.3 2.1.4 2.1.5 Théori 2.2.1 2.2.2 2.2.3 Résolu 2.3.1 2.3.2	 Approche historique de la manipulation d'un système quantique à deux niveaux 2.1.1 Rappel succinct de physique quantique 2.1.2 Système quantique à deux niveaux en RMN 2.1.3 Equations de Bloch 2.1.4 Système à deux niveaux contrôlé par deux paramètres 2.1.5 Système à deux niveaux contrôlé par un paramètre Description du système Présentation des oscillations de Rabi Théorie du contrôle 2.2.1 Présentation d'un problème de contrôle 2.2.2 Résolution d'un problème de contrôle optimal 2.2.3 Application aux systèmes quantiques Résolution numérique d'un problème de contrôle optimal 2.3.1 Méthode de tir Présentation de la méthode Exemples 2.3.2 GRAPE Méthode des matrices auxiliaires Méthode du Split operator Méthode basée sur le PMP 2.3.3 Bilan des deux méthodes

2.1 Approche historique de la manipulation d'un système quantique à deux niveaux

2.1.1 Rappel succinct de physique quantique

Le but de cette section est de présenter brièvement la mécanique quantique au travers des postulats la décrivant. Pour plus de détails le lecteur peut se référer au livre [38]. Les six postulats peuvent se formuler de la manière suivante :

- 1. En mécanique quantique, l'état d'un système à un instant t est entièrement décrit par un vecteur (nommé ket) $|\psi(t)\rangle$ de norme 1 d'un espace de Hilbert \mathcal{H} complexe. Le produit scalaire hermitien de deux kets est noté $\langle \cdot | \cdot \rangle$. Une forme linéaire de \mathcal{H} est notée $\langle \phi |$ et nommée bra. En vertu du théorème de représentation de Riesz, il est possible d'associer un ket à un bra par le produit scalaire, ainsi $\langle \phi | = |\phi\rangle^{\dagger}$, où † désigne l'adjoint d'une matrice ou d'un vecteur. L'adjoint est défini comme le transposé du conjugué complexe.
- 2. Une grandeur, comme la position ou la quantité de mouvement (souvent désignée impulsion), est en physique quantique modélisée par un opérateur, \hat{A} linéaire de \mathcal{H} , hermitien $\hat{A} = \hat{A}^{\dagger}$ appelé observable. Ainsi, l'Hamiltonien \hat{H} est l'opérateur associé à l'énergie du système.
- 3. La mesure d'une observable \hat{A} est décrite par un processus probabiliste. Elle ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres de cette observable, avec une certaine probabilité \mathcal{P} (nous supposons que l'observable n'a que des valeurs propres non dégénérées).
- 4. Pour une valeur propre a de vecteur propre associé $|a\rangle$, cette probabilité est égale à $\mathcal{P} = |\langle \psi | a \rangle|^2$.
- 5. Après la mesure, l'état du système devient $|a\rangle$; c'est le fameux concept de réduction du paquet d'onde.
- 6. L'évolution temporelle de l'état $|\psi(t)\rangle$ est régie par l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{d |\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi(t)\rangle.$$
(2.1)

Notons que le nombre de postulats et leur formulation est encore discuté dans la littérature comme dans l'article récent [32].

Afin de simplifier les notations, nous utilisons dans ce chapitre le système d'unités atomiques dans lequel $\hbar = 1$.

2.1.2 Système quantique à deux niveaux en RMN

En 1936-1937, Isidor Rabi pose le problème suivant : comment évolue le spin nucléaire d'un atome soumis à un champs magnétique classique oscillant [125, 126]. Cela marque les premières tentatives de contrôle d'un système quantique.

La Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) est l'étude de la dynamique des spins nucléaires (spin porté par certains noyaux d'atomes), soumis à des champs magnétiques. Le but de cette section n'est pas de présenter en détail la RMN, mais plutôt de présenter certains principes de contrôle quantique à travers son exemple. Pour une présentation détaillée, le lecteur pourra se référer aux livres [92, 104] et aux manuscrits de thèse suivant [103, 146]. L'opérateur de spin est un opérateur vectoriel. Dans le référentiel \mathcal{R} du laboratoire d'axes $(O, \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{X}}, \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{Y}}, \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{Z}})$, il se décompose tel que $\hat{\boldsymbol{S}} = \left(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z\right)$ et vérifie les propriétés suivantes,

$$\langle m'|\hat{S}_x|m\rangle = (\delta_{m',m+1} + \delta_{m'+1,m})\frac{1}{2}\sqrt{s(s+1) - m'm}$$
 (2.2)

$$\langle m' | \hat{S}_y | m \rangle = (\delta_{m',m+1} - \delta_{m'+1,m}) \frac{1}{2i} \sqrt{s(s+1) - m'm}$$
(2.3)

$$\langle m'|\hat{S}_z|m\rangle = \delta_{m',m}m,\tag{2.4}$$

où s, le nombre quantique de spin, est un nombre entier ou demi-entier et $m = -s, -s + 1, \ldots, s + 1, s$. L'ensemble $(|m\rangle)$ constitue la base propre de l'opérateur \hat{S}_z . L'interaction du spin et d'un champs magnétique $\mathbf{B} = (B_x(t), B_y(t), B_z(t))$ est décrite par l'Hamiltonien

$$\hat{H} = -\gamma_s \hat{S} \cdot B, \qquad (2.5)$$

avec γ_s le facteur gyromagnétique du spin. Dans le cas d'un spin-1/2, s = 1/2 et l'espace de Hilbert est $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, il s'agit donc d'un système quantique à deux niveaux. Ainsi, à partir des relations (2.2), nous pouvons écrire l'Hamiltonien dans la base $\mathcal{B} = (|1/2\rangle, |-1/2\rangle) =$ $(|e\rangle, |f\rangle),$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\gamma_s B_z(t)\hat{\sigma}_z - \frac{1}{2}\gamma_s B_x(t)\hat{\sigma}_x - \frac{1}{2}\gamma_s B_y(t)\hat{\sigma}_y, \qquad (2.6)$$

où

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} = |e\rangle\langle f| + |f\rangle\langle e|$$
(2.7)

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = -i |e\rangle \langle f| + i |f\rangle \langle f|$$
(2.8)

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix} = |e\rangle\!\langle e| - |f\rangle\!\langle f|, \qquad (2.9)$$

sont les matrices de Pauli [38]. Expérimentalement, afin de séparer par effet Zeeman les deux niveaux d'énergie du spin-1/2, un champs constant $B_z = B_0$ est appliqué selon l'axe e_Z . On pose alors $\omega_0 = -\gamma_{1/2}B_0$. L'idée pour contrôler le système est d'appliquer selon les axes e_X et e_Y des champs oscillant à une fréquence ω proche de la fréquence de résonance ω_0 du système. En posant $B_x(t) = \Lambda(t) \cos(\omega t + \varphi(t))$ et $B_y(t) = \Lambda(t) \sin(\omega t + \varphi(t))$ l'Hamiltonien se ré-écrit tel que,

$$\hat{H} = \frac{\omega_0}{2}\hat{\sigma}_z + \frac{\Omega(t)}{2}\cos\left(\omega t + \varphi(t)\right)\hat{\sigma}_x + \frac{\Omega(t)}{2}\sin\left(\omega t + \varphi(t)\right)\hat{\sigma}_y, \qquad (2.10)$$

où l'on a posé $\Omega(t) = -\gamma_s \Lambda(t)$. Dans ce cas général, nous considérons deux paramètres de contrôle : l'amplitude des champs $\Omega(t)$ et le déphasage $\varphi(t)$.

Afin de simplifier les équations, il est possible de se placer dans le référentiel \mathcal{R}' d'axes $(0, \boldsymbol{e_x}, \boldsymbol{e_y}, \boldsymbol{e_z})$ en rotation autour de l'axe $\boldsymbol{e_Z}$ à la vitesse ω , définie par la transformation unitaire $\hat{U} = e^{i\frac{\omega}{2}\hat{\sigma}_z t}$,

$$|\psi\rangle \to \hat{U} |\psi\rangle,$$
 (2.11)

$$\hat{H} \to \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{\dagger} + \imath\hat{U}\hat{U}^{\dagger}.$$
 (2.12)

En utilisant les relations $e^{i\theta\hat{\sigma}_z}\hat{\sigma}_x e^{-i\theta\hat{\sigma}_z} = e^{2i\theta}\hat{\sigma}_+ + e^{-2i\theta}\hat{\sigma}_-$ et $e^{i\theta\hat{\sigma}_z}\hat{\sigma}_y e^{-i\theta\hat{\sigma}_z} = -ie^{2i\theta}\hat{\sigma}_+ + ie^{-2i\theta}\hat{\sigma}_-$, où $\hat{\sigma}_+ = |e\rangle\langle g|$ et $\hat{\sigma}_- = |g\rangle\langle e|$, nous obtenons l'Hamiltonien qui décrit la dynamique du spin dans le référentiel \mathcal{R}' ,

$$\hat{H} = \frac{\Delta}{2}\hat{\sigma}_z + \frac{\Omega(t)}{2}\left(\cos\left(\varphi(t)\right)\hat{\sigma}_x + \sin\left(\varphi(t)\right)\hat{\sigma}_y\right),\tag{2.13}$$

où $\Delta = \omega_0 - \omega$ est l'offset, la différence entre la fréquence de transition d'énergie et la fréquence des champs magnétiques. Dans la base \mathcal{B} , l'état $|\psi\rangle$ se décompose tel que,

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha\\ \beta \end{pmatrix},\tag{2.14}$$

avec α et β des coefficients complexes. Si la mesure est effectuée sur l'observable $\hat{\sigma}_z$, alors $|\alpha|^2$ représente la probabilité de trouver le spin dans son niveau d'énergie excité et $|\beta|^2$ dans son niveau d'énergie fondamental.

2.1.3 Equations de Bloch

Dans le cas d'un système quantique à deux niveaux, il est possible de donner une interprétation géométrique à l'état du système. En effet celui-ci peut être décrit par un vecteur X de \mathbb{R}^3 . Pour cela, nous introduisons

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\!\langle\psi| = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^*\\ \beta\alpha^* & |\beta|^2 \end{pmatrix}, \qquad (2.15)$$

l'opérateur densité, un opérateur hermitien [38]. Il définit l'état du système à une phase globale près. L'évolution temporelle de l'opérateur densité est déterminée par l'équation de Von Neumann :

$$\dot{\hat{\rho}} = -\frac{\imath}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{\rho} \right].$$
(2.16)

Puisque $(\hat{I}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ est une base de l'espace formé par l'ensemble des matrices 2×2 hermitiennes, l'opérateur densité peut se décomposer selon,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left(\hat{I} + x \hat{\sigma_x} + y \hat{\sigma_y} + z \hat{\sigma_z} \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x-iy\\ x+iy & 1-z \end{pmatrix},$$
(2.17)

avec $x, y, z \in \mathbb{R}$, et $x^2 + y^2 + z^2 = 1$, l'état $|\psi\rangle$ étant de norme 1. Ainsi à partir de l'équation (2.16), et en utilisant l'Hamiltonien (2.13), il est possible de déterminer l'équation différentielle régissant l'évolution temporelle du vecteur \boldsymbol{X} de composantes (x, y, z) dans le repère \mathcal{R}' ,

$$\dot{\boldsymbol{X}} = (\Delta \boldsymbol{M}_z + \Omega(t)\cos(\varphi(t))\boldsymbol{M}_x + \Omega(t)\sin(\varphi(t))\boldsymbol{M}_y)\boldsymbol{X}, \qquad (2.18)$$

où,

$$\boldsymbol{M}_{x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{M}_{y} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{M}_{z} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (2.19)

Ce système d'équations différentielles forme ce qui est appelé communément les équations de Bloch. En identifiant (2.15) avec (2.17), il vient,

$$x = 2\Re(\alpha\beta^*), \ y = 2\Im(\alpha^*\beta), \ z = |\alpha|^2 - |\beta|^2.$$
 (2.20)



FIGURE 2.1 – Sphère de Bloch. Le pôle Sud correspond à l'état fondamental $|f\rangle$, le pôle Nord à l'état excité $|e\rangle$. Un point différent des pôles représente une superposition quantique de l'état fondamental et de l'état excité.

Les équations de Bloch peuvent s'interpréter de la manière suivante. Le vecteur X évolue sur la sphère unité S^2 nommée sphère de Bloch (figure 2.1). Le pôle nord (0, 0, 1) représente l'état excité et le pôle sud (0, 0, -1) l'état fondamental; tous les autres points de la sphère représentent une superposition de ces deux états. Par exemple, l'état $|\psi\rangle = 1/\sqrt{2} (|e\rangle + i |f\rangle)$ correspond au point (0, 1, 0). De plus, l'offset Δ induit une rotation constante autour de l'axe e_z . De la même manière, les termes $\Omega(t) \cos(\varphi(t))$ et $\Omega(t) \sin(\varphi(t))$ induisent une précession (contrôlée) de X autour des axes e_x et e_y respectivement. Des exemples de trajectoires sur la sphère de Bloch sont donnés sur les figures 2.4 et 2.5.

Selon les problèmes de contrôle considérés, il peut être préférable de décrire la dynamique d'un système à deux niveaux soit par l'équation de Schrödinger soit par les équations de Bloch, qui ne tiennent pas compte de la phase globale de l'état.

2.1.4 Système à deux niveaux contrôlé par deux paramètres

Nous définissons deux systèmes quantiques à deux niveaux à partir de l'Hamiltonien général (2.13).

Le premier cas est celui où l'on considère deux paramètres de contrôle. Pour une amplitude constante $\Omega(t) = \Omega$, la dynamique est décrite par l'équation,

$$\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} = \left(\frac{\Delta}{2}\hat{\sigma}_{z} + \frac{\Omega}{2}\left(u_{x}(t)\hat{\sigma}_{x} + u_{y}(t)\hat{\sigma}_{y}\right)\right)\left|\psi(t)\right\rangle, \qquad (2.21)$$

avec $u_x = \cos(\varphi(t))$ et $u_y = \sin(\varphi(t))$ les deux paramètres de contrôle contrôlant la rotation

autour des axes e_x et e_y et qui respectent la contrainte,

$$u_x^2(t) + u_y^2(t) = 1. (2.22)$$

Notons qu'expérimentalement il n'y a qu'un seul paramètre de contrôle, la phase φ .

2.1.5 Système à deux niveaux contrôlé par un paramètre

Description du système

Le deuxième cas est celui où l'on ne considère qu'un seul paramètre de contrôle. Le déphasage est un paramètre dont la valeur peut être égale soit à 0, soit à π . L'amplitude $\Omega(t)$ est modifiable au cours du temps et contraint par $0 \leq \Omega(t) \leq \Omega_0$. On pose ainsi $u(t) = \Omega(t) \cos(\varphi(t))$, l'unique contrôle, avec $|u(t)| \leq \Omega_m$. Dans ces conditions la dynamique du spin-1/2 est déterminée par l'équation,



Par conséquent seule la précession autour de e_x est contrôlable.

Présentation des oscillations de Rabi

Lorsque le contrôle est parfaitement en résonance, c'est à dire lorsque $\omega = \omega_0$, la dynamique (2.23) des coefficients est donnée par,

$$\imath \begin{pmatrix} \dot{\alpha}(t) \\ \dot{\beta}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{ut(t)}{2} \\ \frac{u(t)}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}.$$
(2.24)

Dans cette situation, il est possible de montrer qu'un contrôle $u(t) = \Omega(t)$ ($\varphi = 0$ et par conséquent $0 \le u(t) \le \Omega_0$) dont l'aire est égale à π permet d'atteindre l'état $|f\rangle$ depuis l'état $|e\rangle$. En effet la résolution du système (2.24) donne pour $\alpha(0) = 1$ et $\beta(0) = 0$ (système dans l'état $|e\rangle$ à l'instant initial),

$$\begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\left(\int_0^t \frac{u(\tau)}{2} d\tau\right) \\ -\imath \sin\left(\int_0^t \frac{u(\tau)}{2} d\tau\right) \end{pmatrix}.$$
 (2.25)

Ainsi, pour transférer le système de l'état $|e\rangle$ à $|f\rangle$, il faut que $\alpha = 0$ et par conséquent $\int_0^t u(\tau)d\tau = \pi$. Un tel contrôle est couramment appelé une impulsion π . Pour obtenir une superposition des états $|e\rangle$ et $|f\rangle$ avec $|\alpha|^2 = 1/2$ et $|\beta|^2 = 1/2$ (un point de l'équateur de la sphère de Bloch), on peut appliquer un contrôle dont l'aire est égale à $\pi/2$. On parle cette fois-ci d'impulsion $\pi/2$. La figure 2.2 illustre une impulsion π pour un contrôle constant, $u(t) = \Omega_0 = 1$. La figure 2.3 illustre le phénomène d'oscillation de Rabi, c'est à dire un passage périodique du système entre l'état $|e\rangle$ et l'état $|f\rangle$.



FIGURE 2.2 – (a) Contrôle constant d'une aire égale à π . (b) Population de l'état fondamental $|\beta(t)|^2$ en bleu, et excité $|\alpha(t)|^2$ en orange.



FIGURE 2.3 – Population de l'état fondamental $|\beta|^2$ en fonction du temps, pour $\Delta = 0$ en trait plein bleu, $\Delta = 0.5$ en tirets vert et $\Delta = 1$ en pointillé; illustrant les oscillations de Rabi.

Les solutions analytiques trouvées par I.I Rabi permettent donc de manipuler un système quantique à l'aide d'un champ magnétique en résonance avec la fréquence propre du système. Ces solutions sont à l'origine de la RMN qui étudie la dynamique des spins nucléaires et qui donnera lieu ensuite à l'IRM [124]. Cependant, bien que ces solutions soient remarquables, leurs efficacités sont limitées. En effet elles ne permettent pas de répondre aux questions suivantes :

- Comment atteindre un état cible spécifique de la forme $|\psi_t\rangle = 1/\sqrt{2} \left(|e\rangle + e^{i\theta} |f\rangle\right)$ où $\theta \in \mathbb{R}$ est une phase relative?
- Comment contrôler le système en présence d'un offset? En effet, expérimentalement la pulsation du champ magnétique ne peut pas être parfaitement égale à la fréquence propre du système. Ainsi l'offset n'est pas nul. Dans ce cas, une impulsion π ne permet pas de transférer le système de l'état $|e\rangle$ à l'état $|f\rangle$. Ce cas est illustré sur la figure 2.3 où l'on peut voir que pour $\Delta \neq 0$, les oscillations de Rabi ont une amplitude inférieure à 1.
- Par ailleurs, la valeur de l'offset n'est en général pas fixée à un scalaire mais donnée dans un intervalle de confiance. Ainsi, comment transférer le système vers un état cible quel que soit la valeur de ce paramètre? On parle alors d'un contrôle robuste par rapport à l'offset.
- Comment contrôler le système (2.21) en présence de deux paramètres de contrôle?

Toutes ces problématiques sont formalisées par la théorie du contrôle [28, 95, 144].

L'utilisation de la théorie du contrôle permet de systématiser le calcul d'un contrôle pour manipuler n'importe quel système dynamique. Ainsi en plus de répondre aux questions cidessus, elle peut également s'appliquer à des systèmes de plus grande dimension, que nous introduirons dans le chapitre 3.

2.2 Théorie du contrôle

2.2.1 Présentation d'un problème de contrôle

Nous donnons ici une brève introduction d'un problème de contrôle à usage des physiciens. Le lecteur intéressé pourra trouver des formulations rigoureuses dans les références suivantes [28, 95, 144].

Un système de contrôle est défini comme un système dynamique où l'un des paramètres est modifiable. Un système dynamique est caractérisé par son état, un vecteur $\boldsymbol{x} \in \mathcal{K} \subset \mathbb{R}^n$ où \mathcal{K} est le domaine dans lequel il peut évoluer. Dans l'exemple de la fusée donné en introduction, l'état est sa position et sa vitesse. Le sous-espace \mathcal{K} représente l'ensemble des positions et vitesses dans lequel la fusée doit se trouver afin de ne pas subir une accélération trop importante, par exemple. Dans un système quantique, l'état est représenté par la fonction d'onde $|\psi\rangle$, un vecteur d'un espace de Hilbert \mathcal{H} . Bien que nous allons travailler avec des systèmes appartenant à des espaces de Hilbert de dimension infinie, numériquement cet espace est tronqué. Nous ne considérerons que des espaces de Hilbert de dimension finie $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$ dans le reste du manuscrit. Cet espace est équivalent à l'espace \mathbb{R}^{2N} en séparant la partie réelle et la partie imaginaire. L'évolution temporelle du système est décrite par une équation différentielle,

$$\dot{\boldsymbol{x}}(t) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t), \ \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0, \tag{2.26}$$

où \boldsymbol{x}_0 est l'état à l'instant initial, et \boldsymbol{f} est un champ de vecteur modélisant le système. Le contrôle est une fonction $\boldsymbol{u}(t) \in U \subset \mathbb{R}^m$. L'ensemble U correspond aux contraintes sur le contrôle. Typiquement, cette contrainte modélise l'intervalle de valeurs que peut prendre l'amplitude des champs magnétiques dans une expérience de RMN où la puissance de ces champs est limitée. Le contrôle est une fonction temporelle appartenant à l'ensemble admissible,

$$\mathcal{U} = \left\{ \boldsymbol{u} \in L^{\infty}([0, t_f], \mathbb{R}^m) \mid \boldsymbol{u}(t) \in U \right\},$$
(2.27)

où $t_f > 0$ est le temps final, tel que $t \in [0, t_f]$, et $L^{\infty}([0, t_f]$ est l'espace des fonctions mesurables bornées, presque partout. Cet espace permet de prendre en considération des contrôles qui peuvent être bornés et continus par morceaux. La théorie du contrôle regroupe l'ensemble des méthodes mathématiques et numériques permettant de calculer le contrôle u(t) de manière à amener le système de son état initial x_0 à un état final $x(t_f) \in \mathcal{T}$ en un temps t_f . L'état final peut appartenir à un ensemble d'états cibles, auquel cas $x(t_f) \in \mathcal{T}$, avec $\mathcal{T} \subset \mathcal{K}$. Si $\mathcal{T} = \mathcal{K} = \mathbb{R}^n$, alors l'état final est libre. Cependant si $\mathcal{T} = \{x_t\}$, avec x_t un unique état cible, alors l'état final est fixe. Le but du contrôle peut également être de stabiliser le système sur un état ou une trajectoire, défini au préalable. On parle de théorie du contrôle optimal lorsque le contrôle est calculé de manière à minimiser un coût,

$$\mathcal{C}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{u}) = G(\boldsymbol{x}(t_f), t_f) + \int_0^{t_f} F_0(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t) dt.$$
(2.28)

Par exemple le coût $C = d(\mathbf{x}(t_f), \mathbf{x}_t) + t_f$ permet de transférer le système de l'état initial \mathbf{x}_0 à un état cible \mathbf{x}_t en un minimum de temps, avec $d(\cdot, \cdot)$ une distance entre deux états. Un problème de contrôle optimal s'écrit,

$$\begin{cases} \text{Minimiser } \mathcal{C}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}), \\ \boldsymbol{u} \in \mathcal{U}, \\ \dot{\boldsymbol{x}}(t) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t), \ \boldsymbol{x}(t) \in \mathcal{K}, \ t \in [0, t_f], \ t_f \in [0, \infty[, \\ \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0, \ \boldsymbol{x}(t_f) \in \mathcal{T}. \end{cases}$$
(\mathcal{P})

Ainsi formulé, le problème (\mathcal{P}) est un problème d'optimisation sous contrainte, l'état évoluant selon le champ de vecteur f, et de dimension infinie, le contrôle étant à choisir parmi un ensemble infini de fonctions. Notons que dans cette formulation du problème, le temps final t_f et l'état au temps final $\boldsymbol{x}(t_f)$ peuvent être libres ou fixés.

2.2.2 Résolution d'un problème de contrôle optimal

Calcul des variations et multiplicateurs de Lagrange. L'objectif de ce paragraphe est de montrer comment résoudre un problème de contrôle optimal. L'idée consiste à associer calcul des variations et méthode des multiplicateurs de Lagrange [5, 39, 106]. Afin de simplifier le cadre mathématique et se concentrer sur la démarche, nous considérons les hypothèses suivantes :

- L'ensemble admissible est $\mathcal{U} = \{ \boldsymbol{u} \in \mathcal{C}^1([0, t_f], \mathbb{R}^m) \mid \boldsymbol{u}(t) \in \mathbb{R}^m \}$, autrement dit, le contrôle n'est pas contraint, et est une fonction continue et dérivable.
- L'état \boldsymbol{x} n'est pas non plus contraint, $\mathcal{K} = \mathbb{R}^n$, et est de classe $C^1([0, t_f], \mathbb{R}^n)$.
- L'état final est libre, i.e $\mathcal{T} = \mathbb{R}^n$.

- Le temps final t_f est fixé.
- Les fonctions f, F_0 sont de classe $C^1([0, t_f], \mathbb{R}^n)$, et leurs dérivées partielles par rapport à x et u existent et sont continues.

La technique des multiplicateurs de Lagrange permet de transformer un problème d'optimisation sous contrainte en un problème sans contrainte. Considérons une fonction f(x)à minimiser sous la contrainte g(x) = 0. Le problème revient alors à minimiser la fonction S(x,p) = f(x) + pg(x), par rapport aux variables x et p. Dans notre cas, où le coût est une fonctionnelle, la méthode des multiplicateurs de Lagrange donne,

$$S(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{p}) = G(\boldsymbol{x}(t_f)) + \int_0^{t_f} F_0(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t) + \boldsymbol{p}(t) \cdot (\dot{\boldsymbol{x}}(t) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t)) dt. \quad (2.29)$$

Ce nouveau coût étendu est nommé action du problème de contrôle. Le terme sous l'intégrale, $\mathcal{L} = F_0(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t) + \boldsymbol{p}(t) \cdot (\dot{\boldsymbol{x}}(t) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t))$, est un Lagrangien, avec pour coordonnées généralisées \boldsymbol{x} et $\dot{\boldsymbol{x}}$. Le multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^N$ peut être interprété comme la coordonnée canonique de \boldsymbol{x} puisque $\boldsymbol{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}}$.

Une condition pour que \boldsymbol{u} minimise l'action S est que la dérivée fonctionnelle de S soit nulle, $\delta S = 0$. Nous supposons ici que \boldsymbol{x} et \boldsymbol{p} sont des fonctions de classe $C^1([0, t_f], \mathbb{R}^n)$. En notant $\delta \boldsymbol{x}$, $\delta \boldsymbol{u}$ et $\delta \boldsymbol{p}$, les variations des fonctions \boldsymbol{x} , \boldsymbol{u} et \boldsymbol{p} , nous obtenons la dérivée fonctionnelle de S,

$$\delta S = \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{x}(t_f)} \delta \boldsymbol{x}(t_f) + \int_0^{t_f} \frac{\partial F_0}{\partial \boldsymbol{x}} \delta \boldsymbol{x} + \frac{\partial F_0}{\partial \boldsymbol{u}} \delta \boldsymbol{u} + \delta \boldsymbol{p} \cdot (\dot{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{f}) + \boldsymbol{p} \cdot \left(\delta \dot{\boldsymbol{x}} - \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{x}} \delta \boldsymbol{x} - \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{u}} \delta \boldsymbol{u}\right) dt.$$
(2.30)

Après avoir intégré par partie le terme $\mathbf{p} \cdot \delta \dot{\mathbf{x}}$, et en notant que $\delta \mathbf{x}(0) = 0$ puisque la condition initiale est fixée, nous obtenons les quatre conditions suivantes pour que la dérivée fonctionnelle de l'action soit nulle,

$$\dot{\boldsymbol{p}} = \frac{\partial F_0}{\partial \boldsymbol{x}} - \boldsymbol{p} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{x}}$$
(2.31a)

$$\boldsymbol{p}(t_f) = -\frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{x}(t_f)} \tag{2.31b}$$

$$\frac{\partial F_0}{\partial \boldsymbol{u}} = \boldsymbol{p} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{u}}$$
(2.31c)

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}.$$
(2.31d)

Ces conditions peuvent s'interpréter de la manière suivante. La condition (2.31a) correspond à la dynamique du multiplicateur de Lagrange. En utilisant une approche Hamiltonienne, elle peut se ré-écrire comme $\dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\partial H_p}{\partial \boldsymbol{x}}$, où H_p est l'Hamiltonien de contrôle défini par $H_p = \boldsymbol{p} \cdot \dot{\boldsymbol{x}} - \mathcal{L} = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{f} - F_0$. La condition (2.31b) donne une condition au temps final pour le multiplicateur de Lagrange \boldsymbol{p} . La relation (2.31c) donne la condition pour que le contrôle soit solution du problème de contrôle optimal. De la même manière, avec une approche Hamiltonienne, elle peut se ré-exprimer par $\frac{\partial H_p}{\partial \boldsymbol{u}} = 0$. Finalement, la condition (2.31d) correspond à la dynamique de l'état, équivalent à $\dot{\boldsymbol{x}} = \frac{\partial H_p}{\partial \boldsymbol{p}}$.

Principe du maximum de Pontryagin. Le principe du maximum de Pontryagin (PMP) donne une condition nécessaire, pour que le contrôle soit solution du problème (\mathcal{P}). Le PMP

permet de généraliser les conditions (2.31b),(2.31a),(2.31c) et (2.31d) dans le cas d'un contrôle contraint et potentiellement continu par morceaux, d'ensemble admissible

$$\mathcal{U} = \left\{ \boldsymbol{u} \in L^{\infty}([0, t_f], \mathbb{R}^m) \mid \boldsymbol{u}(t) \in U \right\},\$$

et où le temps et l'état final sont libres ou fixés. Les autres hypothèses sont inchangées. Il s'écrit de la manière suivante [144]:

Principe : PMP

Si $\boldsymbol{u}(t)$ est solution du problème de contrôle optimal (\mathcal{P}) , alors il existe une application $\boldsymbol{p}(\cdot) : [0, t_f] \to \mathbb{R}^n$, appelée état adjoint, et un réel $p^0 \leq 0$, appelé variable duale du coût, tels que $(\boldsymbol{p}(\cdot), p^0) \neq (0, 0)$, et tels que pour presque tout $t \in [0, t_f]$,

$$\dot{\boldsymbol{x}}(t) = \frac{\partial H_p}{\partial \boldsymbol{p}},\tag{2.32}$$

$$\dot{\boldsymbol{p}}(t) = -\frac{\partial H_p}{\partial \boldsymbol{x}},\tag{2.33}$$

avec $H_p(t, \boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{p}(t), p^0, \boldsymbol{u}(t)) = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{f} + p_0 F_0$, et la condition de maximisation pour presque tout $t \in [0, t_f]$,

$$H_p\left(t, \boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{p}(t), p^0, \boldsymbol{u}(t)\right) = \max_{\boldsymbol{v} \in U} H_p\left(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{p}(t), p^0, \boldsymbol{v}\right).$$
(2.34)

Si de plus le temps final est libre, on a la condition sur l'Hamiltonien au temps final t_f ,

$$\max_{\boldsymbol{v}\in U} H_p\left(t_f, \boldsymbol{x}(t_f), \boldsymbol{p}(t_f), p^0, \boldsymbol{v}\right) = -p^0 \frac{\partial G}{\partial t}.$$
(2.35)

Si de plus l'état final est libre, on a la condition au temps final pour l'état adjoint

$$\boldsymbol{p}(t_f) = p^0 \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{x}(t_f)}.$$
(2.36)

Le PMP transforme un problème d'optimisation de dimension infinie en un problème d'optimisation de dimension finie. La condition (2.31c) est remplacée par la maximisation de l'Hamiltonien de contrôle pour u(t) pour la prise en compte des contraintes sur le contrôle. La condition sur l'Hamiltonien de contrôle permet de considérer des temps de contrôle non fixés.

Une solution $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}, p^0, \boldsymbol{u})$ respectant ces conditions est dite extrémale.

Si la condition du maximum donne un contrôle en fonction de l'état x et de l'état adjoint p, alors il est qualifié de régulier. Autrement, il est qualifié de singulier.

Le scalaire p_0 permet de prendre en compte le cas où le problème d'optimisation ne dépend pas de F_0 , auquel cas $p_0 = 0$ et le contrôle est dit anormal. Dans le cas où p_0 est non nul, alors le contrôle est dit normal et p_0 est fixé à -1. Notons que (\mathbf{p}, p^0) sont définis à un scalaire près.

2.2.3 Application aux systèmes quantiques

Comme nous l'avons vu précédemment, un système quantique est défini par un vecteur d'un espace de Hilbert complexe \mathcal{H} . Nous allons nous restreindre dans ce manuscrit à des espace $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$. Afin d'appliquer le PMP qui est défini dans un espace réel, nous séparons la partie réelle et imaginaire du système quantique pour travailler dans un espace réel $\mathcal{H} = \mathbb{R}^{2N}$. L'état $|\psi\rangle$ se décompose tel que $|\psi\rangle = |\psi_R\rangle + i |\psi_I\rangle$, avec R correspondant à la partie réelle et I à la partie imaginaire. De la même manière, l'Hamiltonien \hat{H} du système est décomposé selon, $\hat{H} = \hat{H}_R + i\hat{H}_I$. Ainsi, l'équation de Schrödinger se ré-écrit telle que,

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} |\psi_R\rangle \\ |\psi_I\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_I & \hat{H}_R \\ -\hat{H}_R & \hat{H}_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_R\rangle \\ |\psi_I\rangle \end{pmatrix}.$$
(2.37)

Le problème du transfert d'état à état, c'est à dire amener le système d'un état initial à un état cible $|\psi_t\rangle$ est très fréquent en contrôle quantique. Pour réaliser ce type de transfert, nous définissons les coûts,

$$F_1 = 1 - |\langle \psi(t_f) | \psi_t \rangle|^2$$
(2.38)

 et

$$F_2 = 1 - \Re\left(\langle \psi(t_f) | \psi_t \rangle\right), \qquad (2.39)$$

que l'on nomme fidélité. Minimiser la fidélité F_1 revient à atteindre l'état cible à une phase globale près, tandis que minimiser la fidélité F_2 revient à atteindre un état final ayant exactement les mêmes coefficients que l'état cible. Dans le cas de coûts terminaux de la forme $\mathcal{C} = G(|\psi(t_f)\rangle)$, l'Hamiltonien de Pontryagin s'écrit $H_p = \langle \chi_R | \dot{\psi}_R \rangle + \langle \chi_I | \dot{\psi}_I \rangle$, avec $|\chi\rangle = |\chi\rangle_R + i |\chi\rangle_I$ l'état adjoint, soit,

$$H_{p} = \langle \chi_{R} | \hat{H}_{I} | \psi_{R} \rangle + \langle \chi_{R} | \hat{H}_{R} | \psi_{I} \rangle + \langle \chi_{I} | \hat{H}_{I} | \psi_{I} \rangle - \langle \chi_{I} | \hat{H}_{R} | \psi_{R} \rangle$$

= $\Im \left(\langle \chi | \hat{H} | \psi \rangle \right).$ (2.40)

L'état adjoint $|\chi\rangle$ évolue selon la dynamique $\dot{\langle \chi |} = -\frac{\partial H_p}{\partial |\psi\rangle}$, soit $i|\dot{\chi}\rangle = \hat{H} |\chi\rangle$, qui est équivalent à (2.37) en parties réelle et imaginaire. Pour les fidélités F_1 et F_2 , puisque l'état final est libre, nous avons les conditions au temps final pour l'état adjoint,

$$\begin{aligned} |\chi(t_f)\rangle &= \chi_0 \frac{\partial F_1}{\partial \langle \psi(t_f) |} \\ &= -2\chi_0 \langle \psi_t | \psi(t_f) \rangle | \psi_t \rangle \end{aligned}$$
(2.41)

 et

$$\begin{aligned} |\chi(t_f)\rangle &= \chi_0 \frac{\partial F_2}{\partial \langle \psi(t_f) |} \\ &= -\chi_0 |\psi_t\rangle \,, \end{aligned}$$
(2.42)

où χ_0 est la variable duale du coût, équivalent à p^0 .

2.3 Résolution numérique d'un problème de contrôle optimal

Dans un problème de contrôle optimal, bien qu'il soit possible de trouver une solution analytique pour certains problèmes, il est en général nécessaire d'utiliser une résolution numérique. Plusieurs algorithmes de résolution d'un problème de contrôle optimal existent. Parmi eux, nous avons utilisé la méthode de tir et GRAPE, deux algorithmes basés sur le PMP. La thèse repose sur l'application de ces deux algorithmes ainsi que leur adaptation selon les besoins de l'expérience.

Le principe de programmation dynamique qui mène à l'équation de Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB) est une autre méthode pour résoudre un problème de contrôle optimal [14, 15]. L'avantage de cette méthode est qu'elle permet de trouver la solution optimale globale du problème. Cependant, HJB étant une équation aux dérivées partielles, la méthode se heurte à la difficulté de sa résolution numérique; surtout pour des problèmes de grande dimension [20]. Elle a été très peu utilisée en contrôle quantique à l'inverse du PMP.

2.3.1 Méthode de tir

Présentation de la méthode

Dans le cas d'une extrémale régulière, le contrôle s'exprime en fonction de l'état et de l'état adjoint. On peut donc définir la dynamique du système extrémal (2.32) et (2.34) dans \mathbb{R}^{2n} uniquement en fonction de l'état \boldsymbol{x} et de l'état adjoint \boldsymbol{p} . Cette dynamique est notée $\boldsymbol{\dot{z}} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{z},t)$, avec $\boldsymbol{z} = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})$. Cependant, le PMP ne donne pas de condition initiale sur l'état adjoint, ni sur le temps final s'il est libre. Il s'agit alors de trouver une méthode pour déterminer ces inconnues et ainsi amener le système à l'objectif fixé. Si l'état final est fixe, l'objectif de la méthode est de trouver l'état adjoint initial permettant d'avoir la relation $\boldsymbol{x}(t_f) - \boldsymbol{x}_t = 0$; si l'état final est libre, il faut que $\boldsymbol{p}(t_f) - p^0 \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{x}(t_f)} = 0$, donné par la condition de transversalité (2.36). Dans le cas où le temps final est libre, celui-ci est déterminé par la condition (2.35). On note ces objectifs de manière générale $\boldsymbol{K}(\boldsymbol{z}(t_f), t_f) = 0$.

Notons $G(q_0)$ la fonction qui calcule la dynamique F du système extrémal et renvoie l'objectif $K(\mathbf{z}(t_f), t_f)$, en fonction de l'état adjoint initial $\mathbf{p}(0)$ et le temps final t_f s'il est libre. Trouver les zéros de cette fonction permet ainsi de résoudre le problème de contrôle optimal [40, 144]. Cette méthode est nommée méthode de tir. La fonction G est la fonction de tir et les inconnues q_0 les paramètres de tir.

L'algorithme 1 présente le pseudo-code de la méthode de tir. q_0^0 représente les valeurs d'essai du tir. α définit le critère d'arrêt de l'algorithme. Typiquement, la propagation de la dynamique F est évaluée à l'aide d'une méthode RK4, et la détermination des racines de G par une méthode de Newton. J_G est la jacobienne de la fonction de tir G. Elle est numériquement calculée par exemple par une méthode de Broyden [27]. Les codes développés durant la thèse utilisent le package Nutopy [41] lors d'une méthode de tir.

Nous n'avons présenté ici qu'une version de la méthode de tir, à savoir le tir simple, mais il existe bien d'autres variations de celle-ci [17, 19, 29, 69, 144, 145].

29

Algorithme 1 : Méthode de tir
Paramètres d'entrées : $\boldsymbol{q}_{0}^{0}, \boldsymbol{x}_{0}, \boldsymbol{F}, \alpha k \leftarrow 0;$
$\mathbf{tant} \mathbf{que} oldsymbol{G}^k \leq lpha \mathbf{faire}$
1. Calcul de $\boldsymbol{z}(t_f)$ à partir des conditions \boldsymbol{x}_0 et \boldsymbol{q}_0 ,
$oldsymbol{z}(t_f) = oldsymbol{F}\left(oldsymbol{z},t ight)$
2. Evaluation de l'objectif,
$oldsymbol{K}(oldsymbol{z}(t_f),t_f)$
3. Calcul itératif des zéros de la fonction de tir G :
$oldsymbol{q}_0^k \leftarrow oldsymbol{q}_0^k - oldsymbol{J}_{oldsymbol{G}}^{-1} G^k$
4. Calcul de la fonction de tir : G^k
$k \leftarrow k+1;$
$\stackrel{-}{\operatorname{Sortie}}: {m q}_0$

Exemples

Nous montrons l'application de la méthode de tir sur les systèmes (2.21) et (2.23), dans le cas d'un transfert d'état à état en temps minimal. Ces exemples sont traités de manière analytique dans [21].

Cas du système à deux paramètres de contrôle. Dans le cas du système (2.21), où l'on pose $\Delta = 0$ et $\Omega = 1$, les équations de Bloch se réduisent à,

$$\dot{\boldsymbol{X}} = (u_x(t)\boldsymbol{M}_x + u_y(t)\boldsymbol{M}_y)\boldsymbol{X}.$$
(2.43)

L'objectif est de transférer le système du point (1,0,0) au point (0,1,0), ce qui correspond au transfert de $|\psi_0\rangle = 1/\sqrt{2} (|e\rangle + |f\rangle)$ à $|\psi_t\rangle = 1/\sqrt{2} (|e\rangle + i |f\rangle)$, en temps minimum, i.e $\mathcal{C} = t_f$. Dans ce cadre, l'Hamiltonien de contrôle s'écrit,

$$H_p = u_x(t) \boldsymbol{P} \boldsymbol{M}_x \boldsymbol{X} + u_y(t) \boldsymbol{P} \boldsymbol{M}_y \boldsymbol{X}, \qquad (2.44)$$

où $\boldsymbol{P} = (p_x, p_y, p_z) \in \mathbb{R}^3$ est l'état adjoint, évoluant selon,

$$\dot{\boldsymbol{P}} = (u_x(t)\boldsymbol{M}_x + u_y(t)\boldsymbol{M}_y)\boldsymbol{P}.$$
(2.45)

En tenant compte de la contrainte $u_x^2(t) + u_y^2(t) = 1$, la condition du maximum donne,

$$u_x(t) = \frac{\boldsymbol{P}\boldsymbol{M}_x\boldsymbol{X}}{\sqrt{\left(\boldsymbol{P}\boldsymbol{M}_x\boldsymbol{X}\right)^2 + \left(\boldsymbol{P}\boldsymbol{M}_y\boldsymbol{X}\right)^2}}$$
(2.46)

 et

$$u_y(t) = \frac{\boldsymbol{P}\boldsymbol{M}_y\boldsymbol{X}}{\sqrt{\left(\boldsymbol{P}\boldsymbol{M}_x\boldsymbol{X}\right)^2 + \left(\boldsymbol{P}\boldsymbol{M}_y\boldsymbol{X}\right)^2}}.$$
(2.47)

La condition de transversalité sur l'Hamiltonien stipule que celui-ci doit être égale à -1 au temps final. Ainsi, une solution est trouvée en tirant sur les paramètres $\mathbf{P}(0)$ et t_f , i.e. l'état adjoint au temps initial et le temps final.





(a) Contrôle u_x en bleu et u_y en orange en fonction du temps; correspondant à la solution $p_z(0) = -1$.

(b) Trajectoire optimale sur la sphère de Bloch. En trait plein trajectoire correspondant à $p_z(0) = -1$, en pointillé à $p_z(0) = 1$.

FIGURE 2.4 – Contrôle et trajectoire optimaux donnés par la méthode de tir.

La figure 2.4 représente le contrôle optimal et la trajectoire sur la sphère de Bloch. Le résultat de la méthode de tir donne avec une précision de l'ordre de 10^{-7} les solutions analytiques, soit : $p_x(0) \in \mathbb{R}$, $p_y(0) = 1/\sqrt{3}$, $p_z(0) = \pm 1$ et $t_f = \frac{\pi\sqrt{3}}{2}$. La trajectoire optimale passant par l'hémisphère sud de la sphère de Bloch correspond à la solution $p_z(0) = -1$; celle passant par l'hémisphère nord à $p_z(0) = 1$.

Notons qu'il est possible de résoudre l'équation HJB pour ce problème [66].

Cas du système à un paramètre de contrôle. Dans le cas du système (2.23), le but est d'atteindre, toujours en temps minimum, l'état $|f\rangle$ depuis l'état $|e\rangle$. Cela correspond à atteindre le pôle sud depuis le pôle nord sur la sphère de Bloch, selon la dynamique,

$$\dot{\boldsymbol{X}} = (\Delta \boldsymbol{M}_z + \boldsymbol{u}(t)\boldsymbol{M}_x)\boldsymbol{X}.$$
(2.48)

Le contrôle est contraint par $|u| \leq 1$, ce qui correspond physiquement à prendre en compte la valeur maximale de l'intensité des champs magnétiques. L'offset Δ est fixé à -0.5. L'application du PMP conduit à l'expression de l'Hamiltonien de Pontryagin,

$$H_p = \Delta P M_z X + u(t) P M_x X, \qquad (2.49)$$

où $\boldsymbol{P} = (p_x, p_y, p_z) \in \mathbb{R}^3$ est l'état adjoint, évoluant également selon,

$$\dot{\boldsymbol{P}} = (\Delta \boldsymbol{M}_z + \boldsymbol{u}(t)\boldsymbol{M}_x)\boldsymbol{P}.$$
(2.50)

La condition du maximum donne dans ce cas,

$$u(t) = \operatorname{sgn}\left(\boldsymbol{P}\boldsymbol{M}_{x}\boldsymbol{X}\right), \qquad (2.51)$$



(a) Contrôle optimal u en fonction du temps. La structure du contrôle est de type bangbang. Le temps de commutation est l'instant t_1 .



(b) Trajectoire optimale sur la sphère de Bloch. En trait plein pour le temps de commutation t_1 . En pointillé pour le temps t_2 .

FIGURE 2.5 – Contrôle et trajectoire optimaux donnés par la méthode de tir.

où sgn est la fonction signe définie pour tout $x \in \mathbb{R}$,

$$\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} -1, & \operatorname{si} x < 0\\ 0, & \operatorname{si} x = 0\\ 1, & \operatorname{si} x > 0. \end{cases}$$

De la même manière que pour le système à deux contrôles, la condition de transversalité sur l'Hamiltonien stipule que celui-ci doit être égale à -1 au temps final. Les inconnues de la méthode de tir sont $\mathbf{P}(0)$ et t_f .

La figure 2.5 représente le contrôle optimal et la trajectoire sur la sphère de Bloch, donnés par la méthode de tir. Les inconnues de la méthode de tir sont $p_x(0) = \sqrt{3}$, $p_y(0) = 1$, $p_z(0) \in \mathbb{R}$ et $t_f = \frac{2\pi}{\sqrt{1+\Delta^2}}$. Le contrôle est dit bang-bang puisqu'il passe brusquement d'une borne à l'autre de la contrainte. L'instant où le contrôle change de valeur est appelé temps de commutation. Quatre solutions équivalentes existent [21]. Le contrôle peut commuter soit à $t_1 = \frac{1}{\sqrt{1+\Delta^2}} (\pi - \arccos(\Delta^2))$ ou à $t_2 = \frac{1}{\sqrt{1+\Delta^2}} (\pi + \arccos(\Delta^2))$. Le contrôle peut commuter de u = 1 à u = -1 ou de u = -1 à u = 1.

Notons que dans le cas où une étude géométrique du contrôle permet d'en déduire la structure, typiquement bang-bang avec un temps de commutation t_c , alors le tir est grandement simplifié puisqu'il suffit alors de tirer sur les temps t_c et t_f .

2.3.2 GRAPE

Pour des systèmes quantiques de grande dimension, la méthode de tir peut s'avérer difficile voire impossible à mettre en place en raison de la difficulté à initialiser l'algorithme pour un trop grand nombre d'inconnues. Une solution consiste alors à utiliser une méthode du gradient, moins sensible à l'initialisation, pour trouver une solution à un problème de contrôle. Pour cela, le contrôle est discrétisé afin de transformer le problème d'optimisation de dimension infinie en un problème de dimension finie. Dans le contexte des systèmes quantiques et pour des coûts de transfert d'état à état tels que F_1 (2.38) ou F_2 (2.39), il est possible d'exprimer leur gradient de manière analytique. L'un des avantages de cet algorithme réside dans sa capacité à utiliser un contrôle constant par morceaux, permettant ainsi de s'adapter aux contraintes expérimentales. Cet algorithme est appelé Gradient Ascent Pulse Engineering (GRAPE) dans le cadre décrit ci-dessous [5, 94].

Considérons la dynamique générale d'un système quantique $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^N$,

$$\frac{d |\psi(t)\rangle}{dt} = -i \hat{H}(u(t)) |\psi(t)\rangle. \qquad (2.52)$$

où l'Hamiltonien dépend explicitement du contrôle $u(t) \in U$ avec $U = \mathbb{R}$. Afin de transformer le problème de contrôle en un problème d'optimisation de dimension finie, le contrôle est discrétisé de la manière suivante,

$$u(t) = \sum_{n=0}^{N-1} u_n p_n(t), \qquad (2.53)$$

avec $p_n(t)$ la fonction indicatrice,

$$p_n(t) = \begin{cases} 1, & \text{si } t \in [t_n, t_{n+1}] \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Nous désignons par $t_0 = 0, t_1 = T, \ldots, t_N = NT = t_f$ les temps de commutation avec T la durée d'un pas de temps et par u_n l'amplitude de la commande optimisée dans l'intervalle $[t_{n-1}, t_n]$ avec $k \in \{1, \ldots, N\}$. Le problème d'optimisation consiste à minimiser le coût C au temps final t_f par rapport aux N paramètres de contrôle u_n ,

$$\min_{u_0,\dots,u_{N-1}} \mathcal{C}(|\psi(t_N)\rangle), \qquad (2.54)$$

avec $|\psi(t_n)\rangle$ solution de (2.52),

$$|\psi(t_n)\rangle = \hat{U}_{N-1}\dots\hat{U}_0 |\psi_0\rangle, \qquad (2.55)$$

et $\hat{U}_n = e^{-i\hat{H}(u_n)T}$. Pour que les contrôles u_n minimisent le coût \mathcal{C} , il est nécessaire que le gradient de \mathcal{C} par rapport à u, noté $\nabla_u \mathcal{C} = \left(\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial u_0}, \ldots, \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial u_{N-1}}\right)$, soit égal à zéro. L'algorithme consiste à mettre à jour les contrôles u_n par un terme proportionnel et opposé au gradient afin de converger vers un minimum de la fonction coût \mathcal{C} :

$$u_n^{k+1} = u_n^k - \epsilon \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial u_n},\tag{2.56}$$

où $\epsilon > 0$ est le pas. L'algorithme s'arrête lorsque $|\nabla_u \mathcal{C}| < \alpha$ où α est un paramètre proche de zéro. Notons qu'en fonction du point de départ de l'algorithme, autrement dit l'initialisation des contrôles u_n^0 , l'algorithme peut converger vers un minimum local.

Nous dérivons l'expression de $\frac{\partial C}{\partial u_n}$ dans le cas des fonctions de coûts F_1 (2.38) et F_2 (2.39). Le gradient de F_1 s'écrit,

$$\frac{\partial F_1}{\partial u_n} = \frac{\partial}{\partial u_n} \left(1 - \langle \psi(t_f) | \psi_t \rangle \langle \psi_t | \psi(t_f) \rangle \right).$$
(2.57)

En utilisant la relation (2.55), il vient,

$$\frac{\partial F_1}{\partial u_n} = - \langle \psi_0 | \hat{U}_0^{\dagger} \dots \hat{U}_{n-1}^{\dagger} \frac{\partial \hat{U}_n^{\dagger}}{\partial u_n} \hat{U}_{n+1}^{\dagger} \dots \hat{U}_{N-1}^{\dagger} | \psi_t \rangle \langle \psi_t | \psi(t_f) \rangle$$

$$- \langle \psi(t_f) | \psi_t \rangle \langle \psi_t | \hat{U}_{N-1} \dots \hat{U}_{n+1} \frac{\partial \hat{U}_n}{\partial u_n} \hat{U}_{n-1} \dots \hat{U}_0 | \psi_0 \rangle.$$
(2.58)

En définissant alors $|\chi(t)\rangle$ l'état adjoint par :

$$|\chi(t_n)\rangle = \hat{U}_n^{\dagger} \dots \hat{U}_{N-1}^{\dagger} |\psi_t\rangle, \qquad (2.59)$$

l'expression est réduite à,

$$\frac{\partial F_1}{\partial u_n} = -\langle \psi_t | \psi(t_f) \rangle \langle \psi(t_n) | \frac{\partial \hat{U}_n^{\dagger}}{\partial u_n} | \chi(t_{n+1}) \rangle$$

$$- \langle \psi(t_f) | \psi_t \rangle \langle \chi(t_{n+1}) | \frac{\partial \hat{U}_n}{\partial u_n} | \psi(t_n) \rangle .$$
(2.60)

Finalement, en utilisant la propriété, $2\Re(z) = z + z^*$, nous obtenons l'expression du gradient du coût F_1 :

$$\frac{\partial F_1}{\partial u_n} = -2\Re\left(\langle \psi(t_f) | \psi_t \rangle \ \langle \chi(t_{n+1}) | \frac{\partial \hat{U}_n}{\partial u_n} | \psi(t_n) \rangle\right). \tag{2.61}$$

De la même manière le gradient du coût F_2 est donné par :

$$\frac{\partial F_2}{\partial u_n} = -\Re\left(\langle\chi(t_{n+1})|\frac{\partial \hat{U}_n}{\partial u_n}|\psi(t_n)\rangle\right).$$
(2.62)

Le calcul du gradient nécessite ainsi de propager l'état $|\psi(t_n)\rangle$ depuis la condition initiale, de propager en arrière l'état adjoint $\langle \chi(t_n)|$ depuis la condition finale donnée par (2.59), et de calculer le gradient de $\partial_{u_n} \hat{U}_n$. Plusieurs méthodes existent pour calculer ce dernier et nous allons en détailler certaines dans les paragraphes suivants.

L'algorithme 2 présente le pseudo-code de GRAPE. C^0 correspond au coût calculé pour le contrôle u_n^0 et $\alpha > 0$ le critère d'arrêt de l'algorithme. Le paramètre ϵ est le pas de l'algorithme. Il peut être fixe ou déterminé par une recherche linéaire permettant d'assurer une convergence de l'algorithme.

Méthode des matrices auxiliaires

Une étape cruciale de GRAPE est de calculer de manière efficace le gradient de \hat{U}_n . La première méthode que nous allons étudier permet de le calculer de manière exacte [77, 148]. En effet, le calcul de l'exponentielle de la matrice auxiliaire \hat{H}_n ,

$$\hat{\tilde{H}}(u_n) = \begin{pmatrix} \hat{H}(u_n) & 0\\ \partial_{u_n} \hat{H}(u_n) & \hat{H}(u_n) \end{pmatrix}$$
(2.63)

donne,

$$e^{-i\hat{H}_nT} = \begin{pmatrix} \hat{U}_n & 0\\ \partial_{u_n}\hat{U}_n & \hat{U}_n \end{pmatrix}.$$
 (2.64)

Il est ainsi possible d'isoler le terme $\partial_{u_n} \hat{U}_n$ pour calculer le gradient du coût \mathcal{C} .

Algorithme 2 : GRAPEParamètres d'entrées : u_n^0 , $\hat{H}(u_n)$, $|\psi_0\rangle$, $|\psi_t\rangle$, \mathcal{C}^0 , ϵ , α , t_n , T, $k \leftarrow 0$;tant que $|\mathcal{C}^{k-1} - \mathcal{C}^k| \ge \alpha$ faire1. Propager l'état $|\psi(t_n)\rangle$ depuis l'état initial $|\psi_0\rangle$, avec $\hat{U}_n = e^{-i\hat{H}(u_n)T}$, $|\psi(t_n)\rangle = \hat{U}_{n-1} \dots \hat{U}_0 |\psi_0\rangle$ 2. Propager l'état adjoint $\langle \chi(t_n)|$ depuis la condition finale $\langle \chi(t_N)|$, $\langle \chi(t_n)| = \langle \chi(t_N)| \hat{U}_{N-1} \dots \hat{U}_n$ 3. Calculer la correction du contrôle : $u_n^k \leftarrow u_n^k - \epsilon \partial_{u_n} \mathcal{C}^k$ 4. \mathcal{C}^k $k \leftarrow k+1$;Sortie : u_n

Méthode du Split operator

Dans le cas où l'Hamiltonien s'écrit sous la forme $\hat{H} = \hat{H}_0 + u(t)\hat{H}_1$, il est possible de calculer le gradient de \hat{U}_n par la méthode dite du « split operator ». En considérant un pas de temps T petit par rapport au temps de contrôle t_f , $T \ll t_f$, nous pouvons écrire :

$$U_n = e^{-i\hat{H}_0 T} e^{-iu_n \hat{H}_1 T} + \mathcal{O}(dt^2).$$
(2.65)

Ainsi, nous pouvons approximer le gradient de \hat{U}_n par,

$$\frac{\partial \hat{U}_n}{\partial u_n} = -\imath e^{-\imath \hat{H}_0 T} \hat{H}_1 e^{-\imath u_n \hat{H}_1 T} + \mathcal{O}(T^2)$$
$$= -\imath T \hat{U}_n \hat{H}_1 \tag{2.66}$$

Remarquons que l'erreur commise étant de l'ordre de T^2 , plus le pas de temps est petit, plus l'approximation est bonne. Cependant ceci augmente le temps de calcul des propagations de l'état et de l'état adjoint. On peut améliorer cette approximation avec des erreurs en T^3 ou T^4 .

En utilisant ces expressions, nous pouvons déduire une approximation du gradient des coûts F_1 et F_2 :

$$\frac{\partial F_1}{\partial u_n} = -2\Im\Big(\langle\psi(t_f)|\psi_t\rangle \ \langle\chi(t_n)|\hat{H}_1|\psi(t_n)\rangle\Big),\tag{2.67}$$

 et

$$\frac{\partial F_2}{\partial u_n} = -\Im\Big(\langle \chi(t_n) | \hat{H}_1 | \psi(t_n) \rangle\Big).$$
(2.68)

L'avantage de cette méthode par rapport à celle du gradient exacte est de ne pas à avoir à calculer l'exponentielle d'une matrice auxiliaire.

Notons que d'autres méthodes existent pour approximer l'exponentielle d'une matrice ou améliorer l'approche « split operator ».
Méthode basée sur le PMP

Une troisième méthode consiste à réexprimer GRAPE en utilisant le PMP. Ainsi, il n'est plus nécessaire de calculer le gradient de \hat{U}_n . Dans cette formulation, pour un coût $\mathcal{C} = G(|\psi(t_f)\rangle)$, l'Hamiltonien de contrôle est donné par (2.40), avec $|\chi\rangle$ l'état adjoint qui suit la dynamique $i|\chi\rangle = \hat{H}|\chi\rangle$ avec pour condition au temps final,

$$|\chi(t_f)\rangle = \chi_0 \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \langle \psi(t_f) |}.$$
(2.69)

La condition du maximum s'écrit,

$$\frac{\partial H_p}{\partial u} = 0 \Rightarrow \Im\left(\langle \chi(t) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial u} | \psi(t) \rangle\right) = 0, \qquad (2.70)$$

puisque le contrôle u(t) n'est pas contraint.

Les deux versions sont différentes sur plusieurs points.

Premièrement, ici le problème de contrôle est traité en temps continu, puis discrétisé, contrairement au cas ci-dessus où le problème est d'abord discrétisé puis optimisé. Le traitement continu du problème de contrôle est valide pour un pas de temps T très inférieur au temps de contrôle. Ce ne serait plus le cas pour des pas de temps proche du temps de contrôle t_f . Deuxièmement, après discrétisation, le contrôle est mis à jour à chaque itération tel que,

$$u_n^{k+1} = u_n^k + \epsilon \Im\left(\langle \chi(t_n) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial u_n} | \psi(t_n) \rangle\right).$$
(2.71)

Puisque le PMP consiste à maximiser l'Hamiltonien de Pontryagin le signe - de (2.56) devient un signe +.

Notons que pour un Hamiltonien de la forme $\hat{H} = \hat{H}_0 + u(t)\hat{H}_1$, l'utilisation du PMP pour GRAPE revient à la méthode du « split operator » [5].

Un exemple d'utilisation de GRAPE basé sur le PMP est donné dans la section (3.1.1).

Notons que toutes les méthodes présentées ici sont du premier ordre puisque seule la dérivée première du coût est calculée. Il est cependant possible d'utiliser la Hessienne du coût pour mettre à jour le contrôle. On parle alors de méthode du second ordre [48]. Dans ce cas, la Hessienne peut être calculée de manière exacte, par exemple à l'aide de la méthode des matrices auxiliaires, ou approximée itérativement, par exemple par la méthode BFGS [27].

2.3.3 Bilan des deux méthodes

Il est judicieux de choisir l'algorithme d'optimisation en fonction du problème de contrôle quantique posé. En effet, en fonction du système considéré et des besoins expérimentaux il sera plus indiqué d'utiliser GRAPE ou la méthode de tir.

Typiquement, pour des systèmes de petite dimension, il est possible d'utiliser la méthode de tir, dont la solution est trouvée avec une précision numérique remarquable. De plus l'application du PMP permet de prendre en compte une variété de contraintes sur le contrôle et de nombreuses fidélités, comme le temps minimal. L'algorithme présente cependant l'inconvénient d'une très grande sensibilité à l'initialisation des inconnues de la fonction de tir. Dans ce manuscrit, l'utilisation de cette méthode porte uniquement sur des systèmes dont l'état est un vecteur de \mathbb{R}^3 .

A l'inverse, pour des systèmes de grande dimension, par exemple $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^{100}$, l'utilisation de GRAPE est possible, l'algorithme étant moins sensible à l'initialisation. Son avantage est qu'il permet de trouver des solutions directement applicables dans un dispositif expérimental, du fait de la discrétisation temporelle du problème. Les solutions trouvées sont cependant moins précises que celles de la méthode de tir. L'algorithme étant décrit pour un contrôle non contraint, il n'est pas toujours aisé de considérer des contraintes. Finalement, GRAPE ne permet pas de traiter directement le problème du transfert en temps minimum. Notons que l'algorithme KROTOV a des propriétés très proches de GRAPE et présente les mêmes avantages [128].

Dans les deux cas, les deux méthodes donnent des conditions nécessaires d'optimalité et peuvent converger vers un minimum local. Il faut ainsi s'assurer que la solution trouvée correspond au minimum global du coût C.

La thèse présente l'adaptation de ces deux algorithmes pour répondre à des besoins spécifiques de contrôle quantique. Les détails de ces adaptations sont décrits dans les chapitres suivants.

Présentation et modélisation des expériences

Résumé : Ce chapitre est dédié à la description des expériences sur lesquelles nous avons travaillé en collaboration avec des équipes expérimentales. Après avoir introduit l'objectif de l'expérience ainsi que son fonctionnement, nous détaillerons les modèles mathématiques la décrivant. Le chapitre est divisé en deux sections.

Une première section porte sur les deux expériences de condensat de Bose-Einstein du Laboratoire de Collisions - Agrégats - Réactivité de Toulouse.

- L'expérience « BEC » supervisée par Pr David Guéry-Odelin et Dr Bruno Peaudecerf : un réseau optique 1D horizontal et contrôlable permet de modifier l'état d'impulsion d'un condensat. Un dispositif permet en une unique mesure d'obtenir la population du système dans chaque état d'impulsion. Cette expérience est utilisée comme démonstrateur en simulation quantique ou comme capteur quantique.
- L'expérience « interférométrie atomique » supervisée par Dr Alexandre Gauguet et Dr Baptiste Allard. Dans ce cas, un réseau optique 1D vertical et contrôlable permet de modifier l'état d'impulsion d'un condensat. Le réseau est utilisé de manière équivalente à des miroirs et séparatrices en optique afin de créer un interféromètre atomique. Une mesure de la population des états d'impulsions permet d'estimer le champ de pesanteur g. D'un point de vue fondamental, il est envisageable d'utiliser l'expérience pour la détection d'ondes gravitationnelles ou encore de tester le principe d'équivalence faible. L'expérience pourra servir pour le développement de capteurs inertiels.

Une seconde section porte sur l'expérience de qubits fluxonium à l'Institut Walther-Meißner-Institut de Munich sous la direction de Dr Klaus Liegener et Dr Christian Schneider. La réalisation de qubits, systèmes quantique à deux niveaux, est rendue possible par le développement de circuits supraconducteurs. L'expérience consiste à manipuler un fluxonium, un certain type de qubits supraconducteurs qui semble prometteur pour la création de calculateur quantique.

3.1	1 Condensat de Bose-Einstein				
	3.1.1	Atomes froids			
		Présentation de l'expérience 40			
		Modélisation			
		Approximation d'un système à deux niveaux			

		Contrôle optimal	45
3.2		Représentation de Husimi	46
	3.1.2	Interféromètre atomique	48
		Présentation de l'interférométrie atomique	48
		Description de l'expérience	50
		Modélisation	50
	Fluxonium		
		Présentation de l'expérience	53
		Modélisation	54
		Expression des opérateurs	56
		Valeurs numériques	56
		Puits de potentiel	56

3.1 Condensat de Bose-Einstein

3.1.1 Atomes froids

Présentation de l'expérience

L'expérience de l'équipe « BEC » du LCAR consiste à générer puis à manipuler un condensat de Bose-Einstein (BEC) dans un réseau optique unidimensionnel (1D). Un BEC est un gaz de bosons identiques, refroidi à une température proche du zéro absolu, décrit par une fonction d'onde unique. Les systèmes reposant sur les BECs se distinguent par leur grande dimension et leur capacité à être contrôlés, ce qui en fait d'excellents candidats pour la création de simulateurs quantiques [79]. En effet, la simulation quantique implique de reproduire la dynamique d'un système quantique non-contrôlable de grande dimension à l'aide d'un autre système possédant un Hamiltonien similaire et lui contrôlable [4]. La simulation est déterminante pour la résolution de problème provenant de la physique ou de la chimie. Il est par exemple possible de simuler une localisation d'Anderson, phénomène intervenant en physique du solide, par la manipulation d'un BEC dans un réseau 1D [16].

L'expérience débute par le refroidissement par laser puis par évaporation d'un gaz de Rubidium⁸⁷Rb permettant la formation d'un BEC. Le condensat est composé de 5.10⁵ atomes à une température de 90 nK. Il est ensuite piégé dans un piège hybride composé notamment d'un champ magnétique créant un potentiel servant à confiner le BEC et à compenser la gravité. Un réseau optique horizontal et unidimensionnel formant un potentiel périodique est superposé au piège hybride [65]. Le réseau optique est formé par deux lasers contra-propageant, d'une longueur d'onde de $\lambda = 1054$ nm. A l'aide de modulateurs acoustooptiques, il est possible de modifier l'amplitude et la phase des lasers. Conceptuellement, cela revient respectivement à modifier la profondeur du réseau ou à le translater. La figure 3.1, reprise de la thèse de Gabriel Chatelain [34], illustre la situation physique. A la suite d'une séquence de contrôle, le condensat est libéré du piège hybride et suit une trajectoire en chute libre. Après un temps de vol de $t_v = 35$ ms, une caméra CCD permet de mesurer la population du condensat sur les états d'impulsions [65]. Puisque la quantité de mouvement est quantifiée en multiples de $p = \hbar k_L = mv$, où k_L est le vecteur d'onde donné par $k_L = \frac{2\pi}{\lambda}$, la distance entre deux points sur la caméra, représentant la population dans les ordres d'impulsions, est $x = vt_v = 302 \ \mu m$. Plus de détails sur le dispositif expérimental sont présentés dans les manuscrits de thèse [34, 59].



FIGURE 3.1 – Illustration de l'expérience « BEC ». Un condensat, représenté par les sphères violettes, est piégé par un réseau optique sinusoïdal, contrôlable en amplitude s(t) et phase $\varphi(t)$, formé par deux lasers contra-propageant, décrits par des flèches rouges.

Modélisation

Du fait du potentiel périodique créé par le réseau optique [45], la fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ décrivant l'état du BEC, appartenant à l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, évolue en temps selon l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{d |\psi(t)\rangle}{dt} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{s(t)E_L}{2}\cos\left(k_L\hat{x} + \varphi(t)\right)\right) |\psi(t)\rangle, \qquad (3.1)$$

où $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ et $\hat{x} = x$ sont respectivement l'opérateur impulsion et l'opérateur position dans la représentation position, avec x la coordonnée spatiale le long de l'axe du réseau optique. Les paramètres de contrôle sont la profondeur du réseau s(t) et la phase $\varphi(t)$. Nous désignons par m la masse de l'atome, $k_L = 2\pi/(\lambda/2)$ le vecteur d'onde et $E_L = (\hbar^2 k_L^2) / (2m)$ l'énergie associée au réseau. Dans une implémentation typique [61], la longueur d'onde des faisceaux est $\lambda = 1064$ nm et est choisie loin des résonances optiques principales de l'atome, afin de minimiser la diffusion de la lumière et le chauffage du condensat. L'espacement du réseau est ainsi de $d = \lambda/2 \simeq 532$ nm, et l'énergie associée au réseau de $E_L = h^2/(2md^2) = h \cdot 8.111$ kHz. Notons que dans ces conditions, l'interaction entre les atomes du condensat et le potentiel magnétique du piège hybride $V_{\rm hyb} = \frac{1}{2}m\omega_{\rm ext}x^2$ de fréquence $\omega_{\rm ext} = 2\pi \times 25$ Hz, utilisé pour confiner le système, peuvent être négligés du fait de la faible densité du condensat et des déplacements restreints des atomes [65].

Afin de rendre la dynamique adimensionnelle, nous posons le changement de variable suivant :

$$t \to \frac{E_L}{\hbar} t,$$
 (3.2)

$$x \to k_L x.$$
 (3.3)

Cela donne,

Dynamique : Système BEC

$$i\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \left(\hat{p}^2 - \frac{s}{2}\cos\left(\hat{x} + \varphi(t)\right)\right)|\psi(t)\rangle, \qquad (3.4)$$

avec $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}$ and $\hat{x} = x$ dans la représentation position.

Les vecteurs propres de l'opérateur impulsion sont notés $|\phi_{\alpha}\rangle$, de fonction d'onde $\phi_{\alpha}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\alpha x}$ et de valeur propre associée α . Puisque le potentiel est périodique en x, le théorème de Bloch [45, 96] stipule que le paramètre α peut être exprimé comme $\alpha = n+q$, où $n \in \mathbb{Z}$ et $q \in [-0.5, 0.5]$ est le quasi-moment. Le quasi-moment peut formellement prendre n'importe quelle valeur réelle, mais en raison de la périodicité du potentiel, deux quasi-moments séparés par un entier sont équivalents. De plus, cette périodicité implique que le quasi-moment q est conservé pendant le processus de contrôle. Dans le sous-espace d'un quasi-moment donné q, nous pouvons développer un état générique sur la base des ondes planes comme suit,

$$|\psi\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} c_{q,n} |\phi_{q+n}\rangle.$$
(3.5)

En utilisant cette décomposition, nous obtenons la dynamique des coefficients $c_{q,n}$,

$$i\dot{c}_{q,n} = (n+q)^2 c_{q,n} - \frac{s}{4} \left(e^{i\varphi(t)} c_{q,n-1} + e^{-i\varphi(t)} c_{q,n+1} \right).$$
(3.6)

Nous en déduisons l'écriture de l'équation de Schrödinger sous forme matricelle,

$$i\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} = \hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle = \left(\hat{H}_{0} + \cos\left(\varphi(t)\right)\hat{H}_{1} + \sin\left(\varphi(t)\right)\hat{H}_{2}\right)\left|\psi(t)\right\rangle,\tag{3.7}$$

avec

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ c_{q,n-1} \\ c_{q,n} \\ c_{q,n+1} \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad (3.8)$$

$$\hat{H}_{0} = \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ \dots & 0 & ((n-1)+q)^{2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & (n+q)^{2} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & ((n+1)+q)^{2} & 0 & \dots \\ & & & \ddots & \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

 et

$$\hat{H}_{1} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & \\ \dots & -\frac{s}{4} & 0 & -\frac{s}{4} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & -\frac{s}{4} & 0 & -\frac{s}{4} & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & -\frac{s}{4} & 0 & -\frac{s}{4} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad \hat{H}_{2} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & \\ \dots & -i\frac{s}{4} & 0 & i\frac{s}{4} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & -i\frac{s}{4} & 0 & i\frac{s}{4} & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & -i\frac{s}{4} & 0 & i\frac{s}{4} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

$$(3.10)$$

Numériquement, l'espace de Hilbert de dimension infinie est tronqué de sorte que $|n| \leq n_{\max}$, où n_{\max} est choisi en fonction des états initial et cible pour éviter les effets de bord. Dans les simulations, généralement nous avons $n_{\max} = 10$. Ainsi, l'espace tronqué a une dimension de $2 \times n_{\max} + 1 = 21$.

Approximation d'un système à deux niveaux

Notons qu'il est possible d'approximer un système à deux niveaux avec un contrôle, à partir du système (3.7), lorsque $s \ll 1$ [5]. D'un point de vue qualitatif, la faible profondeur du réseau optique permet d'isoler les premiers niveaux d'énergies.

Le calcul des valeurs propres de H, pour $\varphi(t) = 0$, en fonction du quasi-moment donne la structure de bande du réseau, notée $E_m(q)$ $(m \in \mathbb{N})$, et illustrée sur la figure 3.2. Les états de Bloch correspondants sont désignés par $|\Psi_m(q)\rangle$. Lorsque la profondeur du réseau est faible (typiquement s < 0.5) et que le quasi-moment est proche de 0.5, les deux premières bandes d'énergie, $E_0(q)$ et $E_1(q)$, sont largement éloignées des autres, et peuvent être utilisées pour



FIGURE 3.2 – Valeurs propres E(q) de \hat{H} (lignes colorées) et de \hat{p}^2 (ligne noire pointillée), en fonction du quasi-moment.

approximer un système à deux niveaux. Si le BEC est initialement préparé dans le sous-espace engendré par ces deux premières bandes alors il y restera.

Cependant, dans les conditions de l'expérience, la valeur du quasi-moment est approximativement nulle et n'est pas modifiable. Ainsi la transformation unitaire suivante,

$$|\psi\rangle \to \hat{U} |\psi\rangle,$$
 (3.11)

$$\hat{H} \to \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{\dagger} + \imath\hat{U}\hat{U}^{\dagger}, \qquad (3.12)$$

où $\hat{U}=e^{-\imath \hat{p} \varphi(t)},$ permet d'obtenir l'Hamiltonien,

$$\hat{H} = \left(\hat{p} + \frac{\dot{\varphi}(t)}{2}\right)^2 - \frac{s}{2}\cos(\hat{x}), \qquad (3.13)$$

où $\dot{\varphi}(t)/2$ joue le rôle d'un quasi-moment contrôlé. L'expression de \hat{H} est trouvée à l'aide de la relation $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$ valide lorsque $\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] = 0$. Ceci est le cas pour les opérateurs \hat{x} et \hat{p} dont les relations de commutations sont égales à $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hat{I}$ et $[\hat{x}, \hat{p}^2] = 2i\hat{p}$. Notons que le terme $-(\varphi^2/4)\hat{I}$ est négligé dans l'expression (3.13) puisqu'il n'induit qu'une phase globale.

Ainsi, en posant $\frac{\dot{\varphi}(t)}{2} = \frac{1}{2} + \frac{\dot{\varphi}(t)}{2}$ avec $\dot{\tilde{\varphi}}(t)$ un paramètre de contrôle proche de 0, les deux premières bandes sont isolées. Dans la base $(|\phi_{0-1}\rangle, |\phi_{0+0}\rangle)$, l'Hamiltonien s'écrit alors tel que,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2} - \frac{\dot{\tilde{\varphi}}(t)}{2}\right)^2 & -\frac{s}{4} \\ -\frac{s}{4} & \left(\frac{1}{2} + \frac{\dot{\tilde{\varphi}}(t)}{2}\right)^2 \end{pmatrix}.$$
(3.14)



FIGURE 3.3 – Illustration d'un résultat expérimental [99]. Chaque colonne correspond à une image d'adsorption de la distribution sur les états d'impulsions.

En enlevant le terme $\left(\frac{1}{4} + \frac{\dot{\varphi}^2}{4}\right)$ proportionnel à l'identité, l'expression se réduit à celle d'un système à deux niveaux,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\dot{\varphi}^2(t)}{2} & -\frac{s}{4} \\ -\frac{s}{4} & \frac{\dot{\varphi}^2(t)}{2} \end{pmatrix}.$$
(3.15)

Si de plus le changement de base suivant est appliqué,

$$|e\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_{0-1}\rangle + |\phi_{0-0}\rangle)$$

$$|f\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_{0-1}\rangle - |\phi_{0-0}\rangle), \qquad (3.16)$$

alors le système est identique au système à deux niveaux avec un paramètre de contrôle présenté dans la section 2.1.5,

$$\hat{H} = \frac{\Delta}{2}\hat{\sigma}_z + \frac{u(t)}{2}\hat{\sigma}_x, \qquad (3.17)$$

avec la profondeur du réseau jouant le rôle d'offset $\Delta = -\frac{s}{2}$. Le contrôle est identifié par $u(t) = -\dot{\tilde{\varphi}}$.

Des résultats expérimentaux sont présentés dans [5]. Pour une profondeur de s = 0.5 et la contrainte $|\tilde{\varphi}(t)| \leq 0.5$, le temps minimum expérimental est de $t_f = 220 \ \mu s$ avec un temps de commutation de $t_1 = 64 \ \mu s$, pour la solution optimale bang-bang de la section 2.3.1.

Contrôle optimal

Une première utilisation du contrôle optimal dans le cadre de cette expérience a permis de mettre en évidence la possibilité d'atteindre une grande variété d'états cibles [61]. La figure 3.3 montre la grande contrôlabilité du système. Elle présente des résultats expérimentaux, des images d'absorption des atomes. Chaque colonne correspond au résultat d'une expérience pour un état cible spécifique. Mis bout à bout, il est alors possible de créer un motif ou des mots.

Pour cela, la phase optimale est calculée en appliquant GRAPE à la dynamique (3.7). Le but du problème de contrôle est de minimiser la fidélité F_1 (2.38), afin d'amener le système à un état cible $|\psi_t\rangle$. L'application du PMP donne un Hamiltonien de contrôle $H_p = \Im(\langle \chi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle)$, avec $|\chi(t)\rangle$ l'état adjoint, dont la dynamique est également régie par l'équation (3.7), avec la condition au temps final (2.41). La variable duale du coût, χ_0 , est fixée à 1/2. En utilisant la condition de maximisation du PMP, le contrôle est mis à jour à chaque itération par (2.71),

$$\varphi_n' = \varphi_n + \epsilon \Im \left(\langle \chi(t_n) | \left(-\sin\left(\varphi_n\right) \hat{H}_1 + \cos\left(\varphi_n\right) \hat{H}_2 \right) | \psi(t_n) \rangle \right).$$
(3.18)

La figure 3.4 illustre trois exemples numériques de transfert d'état à état réalisable expérimentalement. Pour ces trois exemples, l'état initial du BEC est $|\phi_{0+0}\rangle$. Les états cibles sont décrits dans la base $|\phi_{0+n}\rangle$ avec q = 0. Ils peuvent correspondre à, un unique état d'impulsion, une superposition d'états d'impulsions ou encore un état gaussien ou squeezé [5]. Un état gaussien est un état dont la densité de probabilité est une distribution normale en x et en p, d'écart-type σ_{x_0} et σ_{p_0} , correspondants aux écarts-types de l'état fondamental $|\Psi_0(0)\rangle$ de \hat{H} [83]. Notons que pour une profondeur $s \gg 1$, l'état gaussien tend vers l'état fondamental. Dans cette situation on a $\sigma_{x_0} = s^{-1/4}$ et $\sigma_{p_0} = s^{1/4}/2$. Les positions et impulsions moyennes sont notées $\langle x \rangle = x_c$ and $\langle p \rangle = p_c$. Lorsqu'elles sont différentes de 0, l'état gaussien est dit « déplacé ». Finalement, un état squeezé est un état gaussien pour lequel les écarts-types sont modifiés par un paramètre de squeezing ξ , tel que $\sigma_x = \xi \sigma_{x_0}$ et $\sigma_p = \frac{\sigma_{p_0}}{\xi}$. Ainsi plus le paramètre de squeezing augmente, plus le système sera localisé en p et inversement. Dans la base $|\phi_{0+n}\rangle$, les coefficients $c_{q,n}$ d'un état squeezé s'écrivent :

$$c_{0,n}\left(x_{c}, p_{c}, \xi\right) = \left(\frac{2\xi^{2}}{\pi\sqrt{s}}\right)^{1/4} e^{ix_{c}p_{c}/2} e^{-inx_{c}} e^{-\xi^{2}(n-p_{c})^{2}/\sqrt{s}}.$$
(3.19)

Les paramètres suivants sont utilisés dans la simulation numérique : s = 5, $n_{\max} = 10$, $t_f = 7.6$ (environ 150 μs en unité réelle) et N = 400 pas de temps. Les états cibles sont $|\phi_{0+2}\rangle$, un état gaussien centré $|g(x_c = 0, p_c = 0, \xi = 1)\rangle$ et un état squeezé centré $|g(x_c = 0, p_c = 0, \xi = 1/3)\rangle$. La figure 3.5 montre la sensibilité de l'expérience par rapport aux paramètres s, q et α . La fidélité $1 - F_1$ est tracée pour la propagation du système avec les contrôles de la figure 3.4 pour différentes valeurs de ces paramètres.

La profondeur s du réseau optique peut présenter une inhomogénéité pendant l'expérience. Cependant, sa valeur est calibrée avant chaque expérience et connue avec précision.

La valeur du quasi-moment est proche de zéro. Sa valeur n'est pas précisément connue, mais pour les expériences considérées, nous remarquons que le résultat dépend peu de cette valeur. Le paramètre α correspond à la variation induite par la longueur d'onde λ des lasers du réseau optique sur l'adimensionnement $E_L t/\hbar = \alpha t$, E_L dépendant de λ . Ce paramètre est connu avec une précision de l'ordre de 10^{-4} et n'a pas d'influence sur le résultat de l'expérience.

Représentation de Husimi

L'état est représenté par une fonction, appelée fonction de distribution de Husimi ou distribution Q, qui attribue une amplitude à chaque point de l'espace des phases (x, p) [87]. La représentation de Husimi permet de visualiser un état quantique dans l'espace des phases (x, p). L'amplitude est donnée par la projection en chaque point de l'espace de l'état $|\psi\rangle$ considéré sur un état gaussien $|g(0, 0, 1)\rangle$,

$$Q(x,p) = |\langle g(x,p,1) | \psi \rangle|^2.$$
(3.20)

Dans le cas d'un réseau optique 1D, la distribution de Husimi peut être interprétée comme une densité de probabilité classique sur l'espace des phases.



FIGURE 3.4 – Exemple de trois transferts d'état à état d'un système BEC à partir de $|\phi_{0+0}\rangle$. En rouge le transfert sur $|\phi_{0+2}\rangle$, en vert sur un état gaussien centré $|g(0,0,1)\rangle$ et en bleu sur un état squeezé centré $|g(0,0,1/3)\rangle$. (a) Contrôle en phase $\varphi(t)$. (b) Distribution en impulsion au temps final. (c) Densité de probabilité en position au temps final.



FIGURE 3.5 – Influence des paramètres de l'amplitude du champ s, du quasi-moment q et de la longueur d'onde des lasers du réseau optique sur la fidélité pour les trois exemples présentés dans le corps du texte. En trait rouge plein pour le transfert à l'état $|\phi_{0+2}\rangle$, en trait vert pointillé pour le transfert à $|g(0,0,1)\rangle$ et en trait bleu tiret pour le transfert à $|g(0,0,1/3)\rangle$. Fidélité par rapport à (a) l'amplitude du champ s, (b) au quasi-moment q et (c) à la longueur d'onde. La zone grise correspond à l'incertitude sur la valeur des paramètres.

La figure 3.6 montre la représentation de Husimi des trois états cibles des exemples précédents. En rouge pour l'état $|\phi_{0+2}\rangle$, en vert pour l'état gaussien $|g(0,0,1)\rangle$ et en bleu pour l'état squeezé $|g(0,0,1/3)\rangle$. Nous observons que l'état $|\phi_{0+2}\rangle$ est localisé en p, l'état gaussien $|g(0,0,1)\rangle$ est parfaitement symétrique en p et en x, et l'état squeezé est localisé en x.

Il est possible, avec cette représentation, de comparer les résultats numériques et expérimentaux. Un très bon accord entre les résultats théoriques et expérimentaux a été montré dans le cas d'états gaussiens et squeezés [60].

3.1.2 Interféromètre atomique

Présentation de l'interférométrie atomique

Un interféromètre optique est un dispositif permettant d'obtenir des franges d'interférence à partir de la combinaison de deux ondes électromagnétiques de même fréquence [49]. Ces franges d'interférence sont obtenues en trois étapes. Tout d'abord, une onde électromagnétique incidente est divisée en deux par une séparatrice. Ensuite, les deux faisceaux parcourent des chemins optiques différents, avant de se retrouver à un même point de l'espace grâce à des miroirs, induisant une différence de phase. Enfin, les deux faisceaux sont recombinés pour former des franges d'interférence, qui dépendent de la différence de phase. Ainsi, l'étude des franges d'interférence permet de déterminer la différence de phase, qui donne des informations sur le chemin parcouru par les ondes. Un tel système peut être utilisé comme un capteur, par exemple, pour détecter des ondes gravitationnelles. C'est le cas de l'interféromètre Virgo. Les ondes gravitationnelles sont détectées car elles induisent un déplacement des miroirs [115].

Il est possible de créer des interféromètres à partir d'ondes de matière, on parle alors d'interféromètre atomique. En effet, en vertu de la dualité onde-corpuscule de la mécanique quantique il est possible de considérer une particule quantique comme une onde. Le rôle de la matière et de la lumière est inversé. En effet, l'onde de matière est utilisée pour créer des franges d'interférence tandis que des ondes électromagnétiques sont utilisées comme des miroirs et une séparatrice. Les atomes possédant une masse non nulle, un tel interféromètre présente l'avantage d'être sensible au champ gravitationnel et à ses variations. Ceci n'est pas le cas pour un interféromètre optique classique [140].

En effet, les atomes ont une masse non négligeable, impliquant une plus petite longueur d'onde, ce qui rend les interférences atomiques sensibles aux petites variations de l'environnement, telles que les forces gravitationnelles ou les champs magnétiques faibles [140].

Le but de l'expérience « interférométrie atomique » est de réaliser un interféromètre à partir de l'onde de matière formée par un condensat de Bose-Einstein.

Dans un tel dispositif, les miroirs et les séparatrices sont réalisées par des lasers dont l'application modifie l'état quantique de l'onde de matière.

La précision de la mesure d'un paramètre à l'aide d'un interféromètre atomique dépend directement de l'aire espace-temps du chemin parcouru par les ondes [138]. Ainsi, pour améliorer la précision de la mesure, on peut soit augmenter le temps de l'expérience, soit séparer spatialement les deux ondes. La dernière stratégie est celle employée dans les interféromètres atomiques LMT (à large transfert d'impulsion). Les deux paquets d'ondes, résultant de la séparation d'un paquet d'onde incident, sont accélérés l'un par rapport à l'autre pour augmenter la distance les séparant. Des lasers sont utilisés pour modifier l'état d'impulsion des paquets d'onde, et ainsi les accélérer. On distingue plusieurs types d'interféromètres ato-



FIGURE 3.6 – Représentation de Husimi.

miques, tels que le Mach-Zehnder et le Michelson. Dans les deux cas, on peut considérer des configurations à vitesse constante ou à accélération constante. La figure 3.7 résume les différentes configurations. L'idée de cette figure a été proposée par Bruno Peaudecerf dans une communication interne.

L'expérience est de type Mach-Zehnder à accélération constante. Ce choix est motivé par sa simplicité en comparaison à l'interféromètre Michelson. En effet, il est plus difficile d'accélérer les deux bras en même temps. Cet argument est d'autant plus vrai lorsque l'on veut un transfert robuste (qui permet le transfert quelle que soit la valeur d'un paramètre, par exemple le quasi-moment).

Dans ce contexte, le contrôle optimal semble être une méthode adéquate pour calculer la modulation des lasers qui permet d'obtenir la plus grande séparation en impulsion entre les deux paquets d'onde. Le chapitre 6 présente en détail une stratégie de contrôle originale pour y parvenir.

Description de l'expérience

L'objectif de l'expérience est de créer un démonstrateur d'interféromètre atomique à large transfert d'impulsion dont le but serait la mesure de l'accélération de pesanteur g. L'application de l'expérience est à terme de créer des capteurs pour la détection d'ondes gravitationnelles, de mesure de constantes physiques ou bien de capteurs inertiels.

L'expérience est similaire à celle présenté précédemment dans la section 3.1.1. Un condensat de Bose-Einstein est produit à partir d'un gaz de Rubidium 87. Il est composé de 3×10^4 Ru^{87} atomes. Cependant contrairement à l'expérience « atome froid », ici le condensat est en chute libre selon l'axe Z du référentiel du laboratoire, et piégé dans un réseau optique selon le même axe. Le réseau est composé de deux lasers contra-propagent de longueur d'onde $\lambda = 1054$ nm et peut être modulé en phase et en amplitude.

Comme évoqué plus haut, l'interféromètre est de type Mach-Zehnder à accélération constante (voir figure 3.7). Le nuage d'atome initial est préparé dans un état d'impulsion unique. Une impulsion $\pi/2$ jouant le rôle de séparatrice le place dans une superposition quantique de deux états d'impulsion, créant ainsi les deux bras de l'interféromètre. Une séquence de contrôles permet d'accélérer puis décélérer les atomes de l'un des bras. Une impulsion π est appliquée jouant le même rôle qu'un miroir dans un interféromètre optique. L'autre bras de l'interféromètre est à son tour accéléré et décéléré. Finalement, les nuages d'atomes subissent une dernière impulsion $\pi/2$ pour les recombiner et créer les franges d'interférence. La différence de phase entre les deux paquets d'onde est déterminée en étudiant la population des deux états d'impulsion considérés après un temps de vol des atomes et à l'aide d'un dispositif de mesure dédié [13]. Les atomes étant en chute libre, la différence de phase est directement liée à l'accélération de pesanteur g. Il est ainsi possible de la mesurer. La figure 3.8 illustre le déroulement d'une expérience.

Modélisation

Dans le référentiel du laboratoire, l'évolution de l'état $|\psi\rangle$ du paquet d'onde en chute libre et soumis à un réseau optique vertical, est décrit par l'équation,

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{V_0(t)}{2}\cos\left(2k\hat{z} - \varphi(t)\right) + mg\hat{z}\right)|\psi(t)\rangle,\tag{3.21}$$



FIGURE 3.7 – Configurations possibles d'un interféromètre atomique. Les schémas montrent l'évolution temporelle des bras en positions et en impulsions. A t = 0, les deux bras sont séparés en impulsion. A t_f , les deux bras, qui sont à la même position, sont recombinés pour former des franges d'interférence. (a) Mach-Zehnder à vitesse constante. L'un des bras acquiert une vitesse constante, et à $t = t_f/2$, l'impulsion des deux bras est échangée pour que les deux paquets d'onde soient à la même position au temps $t = t_f$. (b) Michelson à vitesse constante. Le principe est le même que pour le Mach-Zehnder, à la seule différence que les deux bras acquièrent une impulsion constante. (c) Mach-Zehnder à accélération constante. Ici, l'un des deux bras est accéléré en impulsion (phase A), puis décéléré (phase B) pour ensuite rester à impulsion nulle pendant les phases C et D. Les phases sont inversées pour le deuxième bras afin de réunir les paquets d'ondes en position. (d) Michelson à accélération constante. Les deux bras sont accélérés et décélérés en impulsion à deux reprises afin de réunir les paquets d'onde à la même position.



FIGURE 3.8 – Illustration d'un interféromètre atomique de type Mach-Zehnder. (a) Évolution des paquets d'onde dans le réseau optique soumis à l'accélération de pesanteur. La population de l'état du système est obtenue par un dispositif de mesure basée sur une fluorescence des atomes. (b) Diagramme impulsion-temps du paquet d'onde. En rouge les impulsions π et $\pi/2$. En orange, les impulsions d'accélération et en violet les impulsions de décélération.

où H est l'Hamiltonien du système, $V_0(t)$ et $\varphi(t)$ sont respectivement l'amplitude et la phase du réseau et sont les paramètres de contrôle. Nous désignons par m la masse de l'atome et $k = 2\pi/\lambda$ le vecteur d'onde associé au réseau.

Nous introduisons deux transformations unitaires successives pour exprimer la dynamique dans le cadre de la chute libre. La première transformation est définie par $\hat{U}_1 = \exp\left[\frac{i}{\hbar}mgt\hat{z}\right]$ qui mène à l'état $|\psi_1(t)\rangle = \hat{U}_1|\psi(t)\rangle$ et à l'Hamiltonien transformé \hat{H}_1 donné par $\hat{H}_1 = \hat{U}_1\hat{H}\hat{U}_1^{\dagger} + i\hbar\hat{U}_1\hat{U}_1^{\dagger}$. L'Hamiltonien \hat{H}_1 peut être exprimé comme

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2m} (\hat{p} - mgt)^2 - \frac{V_0(t)}{2} \cos\left(2k\hat{z} - \varphi(t)\right).$$
(3.22)

En utilisant la deuxième transformation unitaire $\hat{U}_2 = \exp\left[i\frac{\varphi\hat{p}}{2\hbar k}\right]$, on arrive à

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2m} (\hat{p} - \frac{m\dot{\varphi}}{2k} - Mgt)^2 - \frac{V_0(t)}{2} \cos(2k\hat{z}), \qquad (3.23)$$

où $\hat{H}_2 = \hat{U}_2 \hat{H}_1 \hat{U}_2^{\dagger} + i\hbar \hat{U}_2 \hat{U}_2^{\dagger}$ et l'état du système est maintenant donné par $|\psi_2\rangle = \hat{U}_2 |\psi_1\rangle$. A noter qu'un terme proportionnel à l'opérateur identité a été supprimé de l'expression de \hat{H}_2 puisqu'il ne conduit qu'à un facteur de phase global. L'énergie cinétique est liée à la vitesse relative entre les atomes et le réseau optique. Il est avantageux d'introduire la fréquence du réseau optique dans le référentiel en chute libre sous la forme $\omega_l = \dot{\varphi}$. Expérimentalement, nous implémentons un chirp de fréquence linéaire $\omega_l = \omega - 2kgt$, qui annule efficacement l'influence de la gravité sur la dynamique du système. Par conséquent, il est pratique d'utiliser la fréquence du réseau de chute libre ω comme

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2m} (\hat{p} - \frac{m\omega}{2k})^2 - \frac{V_0}{2} \cos(2k\hat{z}).$$
(3.24)

Nous utiliserons la transformation de coordonnées suivante pour travailler avec des coordonnées sans dimension dans le reste de cette section.

$$t \mapsto \tilde{t} = 4\omega_r t, \tag{3.25}$$

$$\hat{z} \mapsto \hat{z} = k\hat{z},$$
(3.26)

$$\hat{p} \mapsto \tilde{\hat{p}} = \hat{p}/(\hbar k),$$
(3.27)

$$\omega \mapsto \tilde{\omega} = \omega/(4\omega_r), \tag{3.28}$$

où $\omega_r = \frac{\hbar k^2}{2m}$ est la fréquence de recul d'un photon unique et le tilde indique les coordonnées et les opérateurs sans dimension. L'équation de Schrödinger peut alors s'écrire comme suit

Dynamique : Système interféromètre atomique

$$u\frac{d|\psi_2(t)\rangle}{dt} = \left(\left(\frac{\hat{p}}{2} - \frac{\omega(t)}{2}\right)^2 - 2\gamma(t)\cos(2\hat{z})\right)|\psi_2(t)\rangle,\tag{3.29}$$

où $\gamma(t) = \frac{V_0(t)}{16\hbar\omega_r}$, et le signe tilde a été supprimé pour plus de simplicité. La fonction d'onde du système peut être exprimée comme une superposition d'ondes planes, $|\psi\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}} c_n |2n+p_0\rangle$, avec les coefficients complexes c_n tel que $\sum_n |c_n|^2 = 1$ et $|2n+p_0\rangle$ est l'état propre de l'opérateur d'impulsion \hat{p} avec la valeur propre $2n+p_0$, où p_0 est l'impulsion initiale de l'atome. Dans la représentation z, l'onde plane est donnée par $\langle z|2n+p_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp[i(p_0+2n)z]$. Les coefficients $\{c_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$ satisfont l'ensemble d'équations différentielles suivant

$$i\dot{c}_n = \left(n + \frac{p_0 - \omega(t)}{2}\right)^2 c_n - \gamma(t)(c_{n+1} + c_{n-1}), \qquad (3.30)$$

qui est utilisé pour calculer l'évolution temporelle du système. Notez que p_0 est une constante qui n'est pas modifiée par la dynamique. Dans des conditions expérimentales réalistes, tous les atomes n'ont pas le même moment initial p_0 . Au lieu de cela, le système est décrit par un ensemble d'atomes caractérisé par un mélange statistique d'impulsions p_0 qui suit la distribution gaussienne

$$f(p_0) = \frac{1}{\sigma_p \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} (\frac{p_0}{\sigma_p})^2\right],$$
(3.31)

d'écart type σ_p , qui est fixé à 0.3 dans les simulations numériques. La valeur de ce paramètre est liée à la température du condensat qui est d'environ 30 nK.

3.2 Fluxonium

Présentation de l'expérience

Tout comme le transmon, le fluxonium est un type particulier de qubit supraconducteur [72]. C'est un composant électronique constitué d'un condensateur, d'une bobine et d'une jonction josephson en parallèle, et à une température proche du zéro absolue afin de montrer un comportement quantique. Un tel système est un oscillateur quantique anharmonique, c'est à dire possédant des niveaux d'énergies avec des fréquences de transitions Fluxonium

différentes. Il est ainsi possible de ne considérer que les deux premiers niveaux d'énergies, ce qui conduit à l'approximation d'un système quantique à deux niveaux, soit un qubit. L'application d'un courant dans le circuit électronique rend possible la manipulation de l'état quantique du système. L'avantage du fluxonium sur le transmon est sa grande anharmonicité qui permet des temps d'expérience plus long sans décohérence [116].

L'expérience de l'Institut Walther-Meißner-Institut de Munich vise à manipuler un qubit fluxonium pour réaliser des opérations quantiques. L'objectif à terme est d'associer plusieurs qubits fluxonium pour réaliser un calculateur quantique.

Modélisation

Un fluxonium est un type de circuit électronique, refroidi à très basse température (environ 10 mK), composé d'une bobine, d'un condensateur et d'une jonction de Josephson en parallèle. Cette jonction supraconductrice introduit un terme non-linéaire dans l'oscillateur LC, transformant ainsi ce dernier en un oscillateur anharmonique. Cette non-linéarité permet d'augmenter l'écart énergétique entre les deux premiers niveaux d'énergie, isolant efficacement ces niveaux des autres états quantiques du système.

L'évolution temporelle d'un système fluxonium est décrit par l'équation suivante [116, 132],

$$\frac{\hat{H}}{2\pi\hbar} = 4E_C\hat{n}^2 + \underbrace{E_J\cos\hat{\phi} + \frac{E_L}{2}\left(\hat{\phi} + u(t)\right)^2}_{\hat{V}},\tag{3.32}$$

où $\hat{\phi}$ est un opérateur lié au flux dans la bobine et $\hat{n} = -i\frac{\partial}{\partial\phi}$ est un opérateur lié à la charge du condensateur. Ces deux opérateurs forment les coordonnées généralisées où $\hat{\phi}$ joue le rôle de l'opérateur position et \hat{n} celui de l'opérateur impulsion, et respectant la relation $[\hat{\phi}, \hat{n}] = i$. L'énergie potentielle est représentée par l'opérateur \hat{V} . Les paramètres $E_{J,C,L}$ sont des constantes exprimées en GHz (voir tableau 3.1) [132]. Ce sont les énergies associées respectivement à la jonction Josephson, au condensateur et à la bobine. u(t) est le flux externe auxquels sont soumis la jonction et la bobine. Ce flux est créé par un courant électrique délivré par un dispositif de contrôle électronique. L'évolution temporelle de l'état est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d |\psi\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi\rangle, \qquad (3.33)$$

où le temps est exprimé en nanosecondes. Le changement de variable suivant est appliqué afin de pouvoir exprimer la dynamique sous forme matricielle et ainsi être en mesure de calculer numériquement une solution,

$$\hat{n} = \left(\frac{E_L}{8E_C}\right)^{1/4} \hat{\tilde{n}},\tag{3.34}$$

$$\hat{\phi} = \left(\frac{E_L}{8E_C}\right)^{-1/4} \hat{\phi}.$$
(3.35)

L'Hamiltonien devient ainsi,

$$\frac{\dot{H}}{2\pi\hbar} = \underbrace{\frac{\omega}{2} \left(\hat{\tilde{n}}^2 + \hat{\phi}^2\right)}_{\hat{H}_0} + E_J \cos\left(\lambda\hat{\tilde{\phi}}\right) + u(t)E_L\lambda\hat{\tilde{\phi}}.$$
(3.36)

La dynamique du système fluxonium s'écrit alors telle que,

Dynamique : Système Fluxonium

$$i\frac{d\left|\psi\right\rangle}{dt} = 2\pi\left(\frac{\omega}{2}\left(\hat{\tilde{n}}^{2} + \hat{\tilde{\phi}}^{2}\right) + E_{J}\cos\left(\lambda\hat{\tilde{\phi}}\right) + u(t)E_{L}\lambda\hat{\tilde{\phi}}\right)\left|\psi\right\rangle,\tag{3.37}$$

avec $\omega = \sqrt{8E_C E_L}$, $\lambda = \left(\frac{E_L}{8E_C}\right)^{-1/4}$, et le terme $\frac{E_L}{2}u^2\hat{I}$ est négligé car il n'induit qu'une phase globale. En utilisant les opérateurs de création et d'annihilation \hat{a} et \hat{a}^{\dagger} , nous obtenons,

$$\hat{\tilde{n}} = \frac{\imath}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}^{\dagger} - \hat{a} \right), \qquad (3.38)$$

$$\hat{\tilde{\phi}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a} \right). \tag{3.39}$$

L'Hamiltonien \hat{H}_0 de (3.37) peut se ré-écrire comme l'Hamiltonien d'un oscillateur harmonique quantique,

$$\hat{H}_0 = \frac{\omega}{2} \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \hat{I} \right), \qquad (3.40)$$

avec l'opérateur $\hat{N} = \hat{a}^{\dagger} \hat{a}$. On note $(|n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ la base de l'oscillateur harmonique (c'est-à-dire la base propre de \hat{N}). Dans cette base, l'état se décompose de la manière suivante,

$$|\psi\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} c_n |n\rangle.$$
(3.41)

En représentation $-\phi$, la fonction d'onde s'écrit,

$$\langle \phi | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n!}}} \frac{\lambda^{-1/2}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{\lambda^{-2}}{2}\phi^2} H_n\left(\lambda^{-1}\phi\right), \qquad (3.42)$$

avec

$$H_n(z) = (-1)^{-1} e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} \left(e^{-z^2} \right)$$
(3.43)

les polynômes d'Hermite.

On note $(|\zeta_n\rangle)_{n\in\mathbb{N}}$ la base propre de l'Hamiltonien pour u(t) = 0. On a dans cette base,

$$|\psi\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} b_n |\zeta_n\rangle.$$
(3.44)

	Value (in GHz)
E_L	1.00
E_C	0.70
E_J	1.25

TABLE 3.1 – Valeur numérique des paramètres $E_{J,C,L}$ en GHz.

Expression des opérateurs

La base $(|n\rangle)_{n\in\mathbb{N}}$ permet d'exprimer les opérateur de l'Hamiltonien sous forme matricielle. En effet, l'utilisation des relations suivantes,

$$\hat{a}^{\dagger} \left| n \right\rangle = \sqrt{n+1} \left| n+1 \right\rangle \tag{3.45}$$

$$\hat{a}\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle \tag{3.46}$$

permet d'obtenir les expressions suivantes,

$$\langle m|\hat{N}|n\rangle = n\delta_{m,n},\tag{3.47}$$

 et

$$\langle m | \hat{\tilde{\phi}} | n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1}.$$
(3.48)

Valeurs numériques

Les valeurs numériques des paramètres $E_{J,C,L}$ sont présentées dans le tableau 3.1. Le temps caractéristique T_0 de la dynamique est donné par la relation,

$$T_0 = 2\pi\hbar/(E_1 - E_0), \tag{3.49}$$

où E_n désigne la nième énergie propre. Ce temps est de 0.65 nanosecondes pour les valeurs des paramètres considérées.

Puits de potentiel

La figure 3.9 présente le potentiel $V(\phi)$ du fluxonium, les niveaux d'énergie et la densité de probabilité $|\psi(\phi, t)|^2$ associés à l'état fondamental de l'Hamiltonien, soit $|\zeta_0\rangle$.



FIGURE 3.9 – Potentiel V en fonction de ϕ en noir. Les traits pointillés représentent les fréquences ν_i (en GHz) associées aux niveaux d'énergies du système. La densité de probabilité de l'état fondamental de l'Hamiltonien est tracée en bleu.

Contrainte sur le contrôle

Résumé : Les générateurs de fonctions qui permettent de délivrer et mettre en forme le signal de contrôle d'un système quantique produisent généralement un signal constant par morceaux. Le contrôle est alors dit constant par morceaux sur un pas de temps T, caractéristique du générateur. On parle alors de contrôle discret.

L'application du PMP est valide dans le cas d'un contrôle continu en temps. Cependant une récente étude montre qu'il est possible d'étendre le principe pour des contrôles discrets [22]. Une première partie de ce chapitre étudie l'influence du pas de temps T sur le temps minimum pour le cas d'un transfert d'état à état pour deux exemples de systèmes quantiques à deux niveaux. La méthode de tir est utilisée pour calculer la solution optimale.

Une autre problématique qui apparait lorsque l'on veut manipuler des systèmes quantiques est liée à l'électronique du dispositif expérimental. En effet, le signal délivré par le générateur de fonction peut être modifié par son passage dans un circuit électronique servant de lien entre le générateur et le système quantique. Il y a une distorsion du signal de contrôle. Cette distorsion est donnée par une fonction de transfert caractéristique du circuit. Ce type de problème apparait dans des expériences où le temps de contrôle est très court, comme pour le fluxonium où il est de l'ordre de $t_f \approx 10 - 100 ns$. Dans ce contexte, la seconde partie de ce chapitre étudie le temps minimum, en fonction de τ un paramètre lié à la fonction de transfert, pour le transfert d'état à état pour un système à deux niveaux. Une variation de GRAPE adaptée à cette problématique est également présentée sur l'exemple du fluxonium.

4.1	Contrôle discret		
	4.1.1	Version discrète du PMP	60
	4.1.2	Exemple du système à deux niveaux avec deux paramètres de contrôle	61
		Cas N fixe	61
		$\operatorname{Cas} T \text{ fixe } \ldots $	63
	4.1.3	Exemple du système à deux niveaux avec un paramètre de contrôle .	63
4.2	Distorsion		67
	4.2.1	Présentation du problème	67
	4.2.2	Adaptation de GRAPE	69
	4.2.3	Adaptation de la méthode de tir	69
	4.2.4	Exemples	70

	Système à deux niveaux avec un paramètre de contrôle				
	Exemple du système Fluxonium	72			
4.3	Conclusion	75			

4.1 Contrôle discret

Cette partie a pour but de résoudre un problème de contrôle optimal hybride, où le contrôle est discret, une fonction constante par morceaux sur un pas de temps T et où l'état du système évolue de manière continue en temps. Ce problème est directement lié aux dispositifs expérimentaux en physique quantique. En effet, les générateurs de fonction délivrent un signal de contrôle discret avec une certaine période d'échantillonnage T. Le contrôle discrétisé s'écrit formellement sous la forme,

$$\boldsymbol{u}(t) = \sum_{n=0}^{N-1} \boldsymbol{u}_n p_n(t), \qquad (4.1)$$

avec $p_n(t)$ la fonction indicatrice,

$$p_n(t) = \begin{cases} 1, & \text{si } t \in [nT, (n+1)T] \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les N coefficients u_n sont les valeurs du contrôle sur chacun des pas de temps T. Dans cette formulation, le temps final est $t_f = (N-1)T + \delta T$ avec $0 < \delta T \leq T$. Ainsi le dernier intervalle de temps de longueur δT peut être inférieur ou égal à T.

Dans ce cadre, nous appliquons une extension du PMP [22, 23, 24] qui donne une solution nécessaire pour un problème de contrôle optimal avec un contrôle discret, sur deux exemples de contrôles quantiques [55] : les systèmes à deux niveaux avec un paramètre de contrôle (2.23) et deux paramètres de contrôle (2.21). Le but est de réaliser un transfert d'état à état en temps minimum. Deux cas sont considérés.

Le premier considère la situation où le temps final est égal à $t_f = NT$. Le nombre de contrôle N est fixé, et le temps minimum est trouvé en optimisant le pas de temps T.

Le second cas considère un temps d'échantillonge T fixe et un temps final $t_f = (N-1)T + \delta T$. Ici le temps minimum est déterminé en optimisant les paramètres N et δT .

Bien que l'algorithme GRAPE soit bien adapté au problème de contrôle où celui-ci est discret à temps final fixé, il ne l'est pas pour des problèmes de temps minimum. En effet pour déterminer ce dernier, il faut étudier le coût en fonction du temps final. Cette méthode nécessite l'application de GRAPE un grand nombre de fois et s'avère très couteux numériquement. L'utilisation de la version discrète du PMP à l'avantage de pouvoir optimiser directement le temps minimum. Il est ainsi possible d'étudier le temps minimum en fonction de N ou de T suivant le cas considéré. Un algorithme de tir est utilisé pour résoudre les différents problèmes.

4.1.1 Version discrète du PMP

Alors que le PMP dans sa version originale permet au contrôle de changer de valeur à n'importe quel instant, la version discrète du PMP permet de donner une condition nécessaire d'optimalité pour un contrôle constant par morceaux tel que défini ci-dessus. Il se formule de la manière suivante [22] :

Principe : PMP discret

Si $\boldsymbol{u}(t)$, défini par (4.1), est solution du problème de contrôle optimal (\mathcal{P}), avec G = 0, alors il existe une application $\boldsymbol{p}(\cdot) : [0, t_f] \to \mathbb{R}^n$, appelée état adjoint, et un réel $p^0 \leq 0$, appelé variable duale du coût, tels que ($\boldsymbol{p}(\cdot), p^0$)) $\neq (\mathbf{0}, 0)$, et tels que pour presque tout $t \in [0, t_f]$,

$$\dot{\boldsymbol{x}}(t) = \frac{\partial H_p}{\partial \boldsymbol{p}},\tag{4.2}$$

$$\dot{\boldsymbol{p}}(t) = -\frac{\partial H_p}{\partial \boldsymbol{x}},\tag{4.3}$$

avec $H_p(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{p}(t), p^0, \boldsymbol{u}_n) = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{f} + p_0 F_0$. La condition de maximisation pour tout $t \in [nT, (n+1)T], n = 0, 1, \dots, N-1$ est,

$$\frac{1}{T} \left(\int_{nT}^{(n+1)T} \partial_{\boldsymbol{u}} H_p\left(\tau, \boldsymbol{x}(\tau), \boldsymbol{p}(\tau), p^0, \boldsymbol{u}_n\right) d\tau \right) \cdot (\boldsymbol{v} - \boldsymbol{u}_n) \le 0,$$
(4.4)

avec $\boldsymbol{v} \in U$ (l'ensemble représentant les contraintes sur le contrôle 2.2.2). Dans le cas où $\delta T \neq 1$, les bornes de l'intégrale pour $t \in (N-1)T$, t_f sont (N-1)T et t_f , et le facteur 1/T est remplacé par $1/(t_f - nT)$.

Si de plus le temps final est libre, on a la condition sur l'Hamiltonien au temps final $t_f = (N-1)T + \delta T$,

$$H_p\left(t_f, \boldsymbol{x}(t_f), \boldsymbol{p}(t_f), p^0, \boldsymbol{u}(t_f)\right) = 0.$$
(4.5)

Si de plus l'état final est libre, on a la condition au temps final pour l'état adjoint

$$\boldsymbol{p}(t_f) = p^0 \frac{\partial G}{\partial \boldsymbol{x}(t_f)}.$$
(4.6)

Dans cette formulation, la condition du maximum du PMP standard est remplacée par N conditions du maximum sous forme intégrale.

4.1.2 Exemple du système à deux niveaux avec deux paramètres de contrôle

Considérons l'exemple du transfert en temps minimum de (1, 0, 0) à (0, 1, 0) sur la sphère de Bloch d'un système à deux niveaux avec deux paramètres de contrôle, dont la solution continue est étudiée précédemment dans la section 2.3.1. Le but est de calculer une solution pour un contrôle discret, dans deux cas : le nombre N de contrôles est fixé, et la période d'échantillonnage T est fixée.

Cas N fixe

Détermination des solutions. Dans ce cas, le nombre N de contrôles est fixé et le temps final est $t_f = NT$. Les contrôles u_x et u_y sont discrétisés selon (4.1) et on note $u_n^{(x)}$ et $u_n^{(y)}$ les

valeurs des contrôles sur l'intervalle de temps $t \in [nT, (n+1)T]$. Le but est d'optimiser les paramètres de contrôles $u_n^{(x)}$ et $u_n^{(y)}$ ainsi que le pas de temps T afin d'atteindre la cible en temps minimum. La condition du maximum (4.4) s'écrit,

$$N_{n}^{(x)}\left(\boldsymbol{v}_{x}-\boldsymbol{u}_{n}^{(x)}\right)+N_{n}^{(y)}\left(v_{y}-u_{n}^{(y)}\right)\leq0,$$
(4.7)

avec $v_x^2+v_y^2=1$ et où l'on a posé,

$$N_n^{(x)} = \frac{1}{T} \int_{nT}^{(n+1)T} \boldsymbol{P}(\tau) \boldsymbol{M}_x \boldsymbol{X}(\tau)$$
(4.8)

 et

$$N_n^{(y)} = \frac{1}{T} \int_{nT}^{(n+1)T} \boldsymbol{P}(\tau) \boldsymbol{M}_y \boldsymbol{X}(\tau).$$
(4.9)

Une solution est donnée par,

$$u_n^{(x)} = \frac{N_n^{(x)}}{\sqrt{(N_n^{(x)})^2 + (N_n^{(y)})^2}},$$
(4.10)

 et

$$u_n^{(y)} = \frac{N_n^{(y)}}{\sqrt{(N_n^{(x)})^2 + (N_n^{(y)})^2}}.$$
(4.11)

Il peut être avantageux dans ce cas d'optimiser la phase $\varphi \in \mathbb{R}$ définie par $u_x = \cos(\varphi)$ et $u_y = \sin(\varphi)$. Dans ce cas la condition du maximum donne la phase optimale à chaque pas de temps,

$$\tan(\varphi_n) = \frac{\int_{nT}^{(n+1)T} \boldsymbol{P}_n(\tau) \boldsymbol{M}_y \boldsymbol{X}_n(\tau)}{\int_{nT}^{(n+1)T} \boldsymbol{P}_n(\tau) \boldsymbol{M}_x \boldsymbol{X}_n(\tau)}.$$
(4.12)

Nous notons par \mathbf{X}_n et \mathbf{P}_n l'état et l'état adjoint au temps nT. Puisque le contrôle est constant sur un pas de temps T, la solution des équations différentielles (2.43) et (2.45) sur un temps $\tau \in [nT, (n+1)T]$ est donnée par $\mathbf{X}(t) = \mathbf{R}(\tau)\mathbf{X}_n$ et $\mathbf{P}(t) = \mathbf{R}(\tau)\mathbf{P}_n$, avec $\mathbf{R}(\tau)$ la matrice de rotation définie par $\mathbf{R}(\tau) = \exp((\cos(\varphi_n)\mathbf{M}_x + \sin(\varphi_n)\mathbf{M}_y)\tau)$. Il est possible de calculer son expression analytique,

$$\boldsymbol{R}(\tau) = \begin{pmatrix} \sin^2(\varphi_n)\cos(\tau) + \cos^2(\varphi_n) & (1 - \cos(\tau))\sin(\varphi_n)\cos(\varphi_n) & \sin(\tau)\sin(\varphi_n) \\ (1 - \cos(\tau))\sin(\varphi_n)\cos(\varphi_n) & \sin^2(\varphi_n) + \cos(\tau)\cos^2(\varphi_n) & -\sin(\tau)\cos(\varphi_n) \\ -\sin(\tau)\sin(\varphi_n) & \sin(\tau)\cos(\varphi_n) & \cos(\tau) \end{pmatrix}.$$
(4.13)

On peut également déterminer les intégrales de l'équation (4.12). En posant $h_n = \tan(\varphi_n/2)$ et $I_{x,y,z} = \mathbf{P}_n \mathbf{M}_{x,y,z} \mathbf{X}_n$, on obtient un polynôme d'ordre 2 en h_n ,

$$(I_y \sin(T) + (1 - \cos(T)I_z))h_n^2 + 2I_x \sin(T)h_n + ((1 - \cos(T)I_z) - I_y \sin(T)) = 0.$$
(4.14)

Les racines du polynôme se déduisent alors,

$$h_n^{+,-} = \frac{-2I_x \sin(T) \pm \sqrt{(2I_x \sin(T))^2 - 4(I_y \sin(T) + (1 - \cos(T)I_z))((1 - \cos(T)I_z) - I_y \sin(T))}}{2(I_y \sin(T) + (1 - \cos(T)I_z))}$$
(4.15)

Les deux solutions réelles (si elles existent) sont candidates pour être la valeur optimale de φ_n , on note par h_n^+ la solution positive et par h_n^- la solution négative. Comme dans le cas continu, elles conduisent à deux trajectoires symétriques par rapport à l'équateur. Nous sélectionnons la racine positive qui correspond à $p_z(0) < 0$ et à une dynamique dans l'hémisphère sud. Le contrôle optimal est alors donné par :

$$\varphi_n = 2 \arctan(h_n^+). \tag{4.16}$$

Résultats numériques. Pour un N fixé, la méthode de tir est utilisée pour calculer la solution optimale. Comme dans le cas continu, l'Hamiltonien de contrôle est égal à 1 au temps final et les inconnues de la méthode de tir sont $(\mathbf{P}(0), T)$. Dans cette version de la méthode de tir, il est nécessaire à chaque pas de temps T de calculer le contrôle φ_n .

La figure 4.1b présente la solution optimale pour N = 3. La solution est comparée à la solution continue.

Il est possible de calculer le temps minimum pour chaque valeur de N allant de 2 à l'infini. La figure 4.1a illustre la variation du temps minimum en fonction du nombre de contrôles N.

Cas T fixe

Dans ce cas, le pas de temps, ou période d'échantillonnage T est fixé. Le temps final peut s'écrire $t_f = (N - 1)T + \delta T$ et correspond à un dernier pas de temps d'une durée inférieure aux autres.

La seule différence dans ce cas sont les inconnues de la méthode de tir. Les paramètres à déterminer sont le nombre de contrôles N, le temps final t_f et l'état adjoint au temps initial $\mathbf{P}(0)$.

Dans ce deuxième cas, la courbe t en fonction de T a une forme quasi-quadratique lorsque T n'est pas trop petit et des tangentes horizontales lorsque $\delta T = T$. Un exemple de solutions optimales est donné sur la figure 2 pour N = 3 et $\delta T = 0$. On observe que les trajectoires numériques et continues sont très proches l'une de l'autre sur la sphère de Bloch, alors que les deux contrôles sont assez différents même s'ils ont une évolution similaire.

4.1.3 Exemple du système à deux niveaux avec un paramètre de contrôle

La même étude est réalisée sur l'exemple du système à deux niveaux avec un paramètre de contrôle (2.23). Nous ne considérerons que le cas où N est fixe et où le temps final prend la forme $t_f = NT$. Le contrôle u est discrétisé selon l'équation (4.1).

Dans cette situation, l'application du PMP discret donne la condition de maximisation suivante,

$$(v - u_n) \frac{1}{T} \int_{nT}^{(n+1)T} \phi_n(\tau) d\tau \le 0, \qquad (4.17)$$



(a) Évolution du temps minimum en fonction du nombre de pas de temps N. $t_f^{(c)}$ correspond au temps minimum pour un contrôle continu en temps.



(b) Contrôle optimal pour N fixé à 3. Dans ce cas, on a $t_f = 3T$. En trait plein le contrôle discret. En trait pointillé le contrôle du problème en temps continu. Le contrôle u_x est en bleu et le contrôle u_y en orange. Le trait vertical noir correspond au temps minimum pour la solution continue en temps.

FIGURE 4.1 – Système à deux niveaux avec deux paramètres de contrôle. Cas N fixe.



(a) Évolution du temps minimum en fonction du nombre de pas de temps N. $t_f^{(c)}$ correspond au temps minimum pour un contrôle continu en temps.



(b) Contrôle optimal pour N fixé à 3. Dans ce cas, on a $t_f = 3T$. En trait plein le contrôle discret. En trait pointillé le contrôle du problème en temps continu. Le contrôle u_x est en bleu et le contrôle u_y en orange. Le trait vertical noir correspond au temps minimum pour la solution continue en temps.

FIGURE 4.2 – Système à deux niveaux avec deux paramètres de contrôle. Cas T fixe.

avec $v \in [-1, 1]$. La fonction $\phi_n(\tau)$ est la fonction de commutation définie par $\phi_n(\tau) = \mathbf{P}(\tau)\mathbf{M}_x\mathbf{X}_n(\tau)$. On note $\Gamma_n(u_n)$, la fonction,

$$\Gamma_n(u_n) = \frac{1}{T} \int_{nT}^{(n+1)T} \phi_n(\tau) d\tau.$$
(4.18)

Sur la durée d'un pas de temps T, le contrôle est constant et il est possible de calculer de manière analytique la solution de (2.48) et (2.50) [21],

$$x_n(\tau) = x_n - \frac{\Delta B}{\Omega} - \frac{\Delta}{\Omega} \left(A\sin(\Omega\tau) - B\cos(\Omega\tau)\right)$$
(4.19)

$$y_n(\tau) = A\cos(\Omega\tau) + B\sin(\Omega\tau)$$
(4.20)

$$z_n(\tau) = z_n + \frac{u_n B}{\Omega} + \frac{u_n}{\Omega} \left(A\sin(\Omega\tau) - B\cos(\Omega t)\right)$$
(4.21)

 et

$$p_{x_n}(\tau) = p_{x_n} - \frac{\Delta D}{\Omega} - \frac{\Delta}{\Omega} \left(C \sin(\Omega \tau) - D \cos(\Omega \tau) \right)$$
(4.22)

$$p_{y_n}(\tau) = C\cos(\Omega\tau) + D\sin(\Omega\tau)$$
(4.23)

$$p_{z_n}(\tau) = p_{z_n} + \frac{u_n D}{\Omega} + \frac{u_n}{\Omega} \left(C \sin(\Omega \tau) - D \cos(\Omega t) \right), \qquad (4.24)$$

avec $\Omega = \sqrt{u_n^2 + \Delta^2}$, $A = y_n$, $B = \frac{\Delta x_n - u_n z_n}{\Omega}$, $C = p_{y_n}$ et $B = \frac{\Delta p_{x_n} - u_n p_{z_n}}{\Omega}$. Il est ainsi possible de trouver une formule analytique pour la fonction $\Gamma(u_n)$ en intégrant (4.18),

$$\Gamma_n(u_n) = \frac{u_n}{\Omega^2} \left(\Delta L_{z_n} + uL_{x_n} \right) + \frac{\Delta}{\Omega^2} \left(\Delta L_{x_n} - uL_{z_n} \right) \operatorname{sinc}\left(\Omega T\right) + \frac{\Delta}{\Omega} L_{y_n} \frac{\cos\left(\Omega T\right) - 1}{\Omega T} \quad (4.25)$$

où l'on a noté L le moment cinétique défini par $L = X \times P$ avec pour coordonnées (L_x, L_y, L_z) . Finalement, le contrôle optimal u_n est trouvé en étudiant la fonction Γ_n :

- Si $\min_{u_n} \Gamma_n > 0$, alors $\Gamma_n(u_n) > 0$ et $v u_n \leq 0$; donc $u_n = 1$.
- Si $\max_{u_n} \Gamma_n < 0$, alors $\Gamma_k(u_n) < 0$ et $v u_n \ge 0$; donc $u_n = -1$.
- Si $\max_{u_n} \Gamma_n > 0$ et $\min_{u_n} \Gamma_n < 0$, l'unique solution est $\Gamma_n(u_n) = 0$. Le contrôle optimal u_n est alors une racine de Γ_k sur [-1, 1].

Comme prévu, on obtient dans la limite $T \to 0$ que $\Gamma \approx \phi$, et on retrouve la cas continu. Dans le cas général, Γ_n est une fonction de u_n dans l'intervalle [-1, 1]. A chaque pas de temps, on calcule numériquement le maximum, le minimum et les zéros de Γ_n pour trouver la valeur correspondante de u_n .

La figure 4.3 montre les résultats de la méthode de tir pour différentes valeurs de N. Dans ce cas, nous observons numériquement que la solution est très sensible aux conditions initiales du vecteur adjoint. Pour chaque valeur de N, l'initialisation de la méthode de tir a été adaptée. Malgré ces difficultés numériques, nous montrons sur la figure 4.3a que le temps minimum t_f converge très rapidement vers sa limite continue en fonction de N, la différence étant de l'ordre de 10^{-4} pour N = 20. Le nuage de points visible sur cette figure est une signature des instabilités numériques de l'algorithme, même si une tendance claire peut être observée avec une convergence exponentielle approximative.

La figure 4.3 montre le contrôle optimal pour N = 4. La solution optimale bang-bang dans la limite continue est remplacée par un autre contrôle constant par morceaux mais avec des temps de commutation fixes. Alors que le premier bascule entre -1 et 1 (le contrôle singulier n'est pas optimal dans ce cas), le second peut prendre des valeurs dans l'intervalle [-1, 1]comme le permet la version discrète du PMP. Ce degré de liberté compense le fait que la commutation ne peut avoir lieu à n'importe quel instant $t \in [0, t_f]$. Pour la plupart des valeurs de N, nous observons que l'algorithme trouve une structure similaire à celle de la figure 4.3, c'est-à-dire un contrôle optimal avec trois parties constantes d'amplitudes respectives -1, uet +1. Le contrôle $u = u_0$ est appliqué pendant un seul pas de temps autour du temps de commutation de la solution continue. Ce paramètre $u_0 \in [-1, 1]$ dépend de manière assez complexe de N.

4.2 Distorsion

4.2.1 Présentation du problème

Le signal de contrôle est délivré par un générateur de fonction, comme nous l'avons vu sous forme d'impulsions constantes par morceaux. Cependant ce signal n'est pas délivré tel quel au système quantique mais suit au préalable un chemin électronique, servant de lien entre le signal généré et le signal créé physiquement, par exemple par des dispositifs acousto-optiques dans une expérience de type BEC [65]. Le signal de contrôle peut subir une modification, une distorsion, par son passage dans le circuit électronique. Cette distorsion est modélisée par une fonction de transfert, caractéristique du circuit électronique [137]. Un problème similaire a déjà été étudié dans l'article suivant [114].

La distorsion, si elle est importante, modifie de manière significative le signal de contrôle. Le signal n'étant plus le même, le système n'atteindra pas l'objectif fixé par le problème de contrôle. Il est ainsi fondamental de prendre en compte un tel phénomène afin de modéliser au mieux l'expérience.

Considérons la distorsion du signal de contrôle suivant,

$$\tau \dot{u}_R(t) + u_R(t) = u(t). \tag{4.26}$$

u(t) est le contrôle constant par morceaux délivré par le générateur de fonction et défini par (4.1). u_R est le contrôle distordu par la fonction de transfert du circuit électronique. Notons que nous considérons ici une distorsion créée par une fonction de transfert linéaire, de retard τ . Ce n'est cependant pas le seul cas envisageable. Dans le cas général ont peut exprimer la fonction de transfert à l'aide d'une transformée de Laplace.

La solution de cette équation est donnée par,

$$t \in [t_0, t_1] : u_R(t) = u_0 \left(1 - e^{-(t-t_0)/\tau} \right)$$

$$t \in [t_1, t_2] : u_R(t) = u_1 \left(1 - e^{-(t-t_1)/\tau} \right) + u_0 e^{-(t-t_1)/\tau} \left(1 - e^{-T/\tau} \right)$$

$$t \in [t_2, t_3] : u_R(t) = u_2 \left(1 - e^{-(t-t_2)/\tau} \right) + u_1 e^{-(t-t_2)/\tau} \left(1 - e^{-T/\tau} \right) + u_0 e^{-(t-t_2)/\tau} \left(e^{-T/\tau} - e^{-2T/\tau} \right)$$

...

que l'on peut écrire sous une forme plus compacte,

$$u_R(t) = \sum_{k=0}^{N-1} u_k f_k(t), \qquad (4.27)$$



(a) Contrôle optimal u en fonction du temps. La structure du contrôle est de type bang-bang. Le temps de commutation est l'instant t_1 .



(b) Contrôle optimal pour N fixé à 4. Dans ce cas $t_f = 4T$. En trait plein le contrôle discret. En trait pointillé le contrôle du problème en temps continu. Le trait vertical noir correspond au temps minimum pour la solution continue en temps.

FIGURE 4.3 – Système à deux niveaux avec un paramètre de contrôle. Cas N fixe.

68

avec $f_k(t)$, la fonction de transfert suivante,

$$f_k(t) = \begin{cases} 0, & \text{if } t < t_{k-1} \\ 1 - e^{-(t - t_{k-1})/\tau}, & \text{if } t \in [t_{k-1}, t_k] \\ e^{-(t - t_k)/\tau} \left(1 - e^{-T/\tau} \right), & \text{if } t > t_k. \end{cases}$$

Le problème consiste à optimiser le contrôle distordu $u_R(t)$ et non plus le contrôle u(t), afin d'atteindre l'objectif fixé.

Notons que nous ne considérons qu'un seul paramètre de contrôle dans cette section afin de simplifier l'étude.

4.2.2 Adaptation de GRAPE

L'algorithme GRAPE peut être adapté pour prendre en compte le phénomène de distorsion et pour optimiser les paramètres u_k . Supposons un contrôle constant par morceaux non contraint $u(t) \in \mathbb{R}$. Le contrôle distordu résultant $u_R(t)$ n'est plus constant par morceaux mais évolue selon l'équation (4.26). Or l'algorithme GRAPE est formulé pour optimiser des contrôles constants par morceaux. Considérons alors le contrôle constant par morceaux,

$$v(t) = \sum_{j=0}^{J} v_j p_j(t), \qquad (4.28)$$

avec $J \gg N$. Cela revient à approximer le contrôle distordu par un contrôle constant par morceaux avec une maille temporelle très fine, tel que $v_j = u_R(t_j)$.

Le gradient d'une fidélité F quelconque par rapport aux coefficients u_k est calculé en décomposant le gradient par rapport aux paramètres u_j ,

$$\frac{\partial F}{\partial u_k} = \sum_j^J \frac{\partial F}{\partial u_j} \frac{\partial u_j}{\partial u_k} \tag{4.29}$$

$$=\sum_{j}^{J}\frac{\partial F}{\partial u_{j}}f_{k}(t_{j}).$$
(4.30)

Les propagations avant et arrière sont réalisées à l'aide des contrôles u_j , dont on calcule le gradient de manière standard (voir chapitre 2.3.2). Les contrôles u_k sont mis à jour à chaque itération par la relation (4.30).

4.2.3 Adaptation de la méthode de tir

Il est possible d'appliquer le PMP dans le cadre d'un contrôle distordu. Pour cela, il faut considérer la dynamique étendue,

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{x}}(t) &= \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}(t), u_R(t), t\right) \\ \dot{u}_R(t) &= \left(u(t) - u_R(t)\right) / \tau. \end{cases}$$
(4.31)

Dans cette formulation, le problème consiste toujours à optimiser le paramètre de contrôle u. Cependant, ce paramètre est remplacé par le contrôle distordu dans la dynamique \mathbf{f} , dont l'évolution temporelle dépend de u. Le paramètre $u_R(t)$ est nul au temps initial, $u_R(0) = 0$, et libre au temps final, $u_R(t_f) \in U$.

4.2.4 Exemples

Système à deux niveaux avec un paramètre de contrôle

Reprenons le système (2.23) avec un contrôle continu dans le temps. Nous savons que la structure optimale est de type bang-bang. Expérimentalement, cela revient à effectuer deux impulsions d'amplitude constante -1 et 1 de durée différente. Ce type d'impulsion est sujet au phénomène de distorsion après son passage dans le dispositif électronique. L'objectif est ainsi de trouver le contrôle optimal u(t) permettant d'atteindre le pôle sud depuis le pôle nord en temps minimum, alors que le système évolue selon le contrôle distordu $u_R(t)$.

La dynamique de (2.23) qui tient compte de la distorsion du contrôle (4.31) s'écrit,

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{X}} = (\Delta \boldsymbol{M}_z + u_R(t) \boldsymbol{M}_x) \boldsymbol{X} \\ \dot{u}_R(t) = (u(t) - u_R(t)) / \tau, \end{cases}$$
(4.32)

L'application du PMP dans ce cas permet d'écrire l'Hamiltonien de Pontryagin,

$$H_p = \Delta \left(\boldsymbol{P} \boldsymbol{M}_z \boldsymbol{X} + \frac{p_{u_R} u}{\Delta \tau} \right) + u_R(t) \left(\boldsymbol{P} \boldsymbol{M}_x \boldsymbol{X} + \frac{p_{u_R}}{\tau} \right).$$
(4.33)

Le maximum de cet Hamiltonien est obtenu lorsque

$$u = \operatorname{sgn}(p_{u_R}). \tag{4.34}$$

L'évolution temporelle de l'état adjoint $(\boldsymbol{P}, p_{u_R})$ est alors,

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{P}} = (\Delta \boldsymbol{M}_z + u_R(t) \boldsymbol{M}_x) \boldsymbol{P} \\ \dot{p}_{u_R}(t) = \frac{p_{u_R}}{\tau} - \boldsymbol{P} \boldsymbol{M}_x \boldsymbol{X}. \end{cases}$$
(4.35)

Finalement, le temps final étant libre l'Hamiltonien de Pontryagin doit être égal à 1 au temps final. Et l'état u_R étant libre au temps final, l'état adjoint p_{u_R} doit être nul à ce même instant.

Pour un retard τ donné, il est possible d'utiliser la méthode de tir pour calculer le contrôle optimal u(t). Dans ce cas, les inconnues de la méthode de tir sont l'état adjoint au temps initial $(\mathbf{P}(0), p_{u_R}(0))$ et le temps final t_f .

La figure 4.4 montre le contrôle optimal pour $\tau = 0.02$ et $\tau = 2$. Nous remarquons que le contrôle optimal garde sa structure bang-bang. Pour compenser le phénomène de distorsion, la durée des deux impulsions est augmentée. Ainsi, le temps de commutation t_1 est supérieur à celui du cas sans distorsion $t_1^{(s)} = \frac{1}{\sqrt{1+\Delta^2}} (\pi - \arccos(\Delta^2))$ et le temps minimum pour rejoindre la cible est supérieur au temps minimum $t_f^{(s)} = \frac{2\pi}{\sqrt{1+\Delta^2}}$.

La figure 4.5 montre le temps minimum t_f en fonction du retard τ . Nous remarquons que son évolution croît linéairement en fonction de τ , soit $t_f(\tau) = \frac{a\tau}{b}$. Une régression linéaire permet de déterminer les constantes a = 1.23 et $b \approx t_f^{(s)}$. Notons que pour cette figure, sachant que le contrôle garde une structure bang-bang, il est possible de simplifier la méthode de tir. En effet, dans ce cas, les inconnues se réduisent aux deux temps t_c et t_f ; l'objectif de la fonction de tir se résume à minimiser la distance à la cible. L'avantage est de considérer un problème de minimisation avec seulement deux inconnues au lieu de la recherche de zéros d'une fonction à 5 inconnues, dont l'initialisation est très sensible.



FIGURE 4.4 – Contrôle optimal u en vert, et le contrôle retardé u_R associé en bleu, pour atteindre le pôle sud depuis le pôle nord en temps minimum. Le premier trait rouge pointillé correspond au temps $t_1^{(s)}$ et le deuxième au temps minimum $t_f^{(s)}$.


FIGURE 4.5 – Évolution du temps minimum t_f en fonction du retard τ en trait plein bleu. Le trait orange pointillé correspond à sa régression linéaire. Le trait noir pointillé horizontal correspond au temps minimum $t_f^{(s)}$.

Exemple du système Fluxonium

Dans l'expérience du fluxonium, le temps typique de contrôle est de l'ordre de la dizaine de nanosecondes pour un transfert d'état à état. Au-delà, le phénomène de décohérence apparaît et il devient impossible de réaliser une opération quantique.

Dans ce contexte, le signal de contrôle qui est une fonction constante par morceaux, est généré à une fréquence d'échantillonnage de l'ordre du GHz. Dans le dispositif considéré, la période d'échantillonnage est T = 0.5 ns. Il est expérimentalement difficile de générer un contrôle parfaitement constant par morceaux à une telle fréquence. L'effet de la distorsion n'est alors plus négligeable et il convient de la prendre en compte pour espérer amener le système à la cible.

La distorsion est modélisée par la relation (4.26), avec $\tau = 0.1 ns$. Afin d'illustrer l'importance du phénomène, nous optimisons un premier contrôle sans considérer le phénomène de distorsion, pour le transfert de $|\zeta_0\rangle$ à $|\zeta_1\rangle$ en $t_f = 10 ns$. Ensuite, la dynamique est propagée avec ce contrôle mais avec une distorsion caractérisée par le retard τ . La figure 4.6a montre les contrôles u(t) et $u_R(t)$ ainsi que la population au temps final du système dans la base $(|\zeta_n\rangle)_{n\in\mathbb{N}}$. La fidélité $F_1 = |\langle \psi(t_f) | \zeta_1 \rangle|^2$ est égale à 0.76. Ainsi, l'objectif n'est pas atteint si le phénomène de distorsion n'est pas pris en compte dans le problème de contrôle.

La figure 4.6b montre quant à elle les contrôles u(t) et $u_r(t)$ et la population pour un contrôle optimisé en tenant compte de la distorsion. La fidélité F_1 est alors de 0.99, et l'objectif du problème de contrôle est atteint.



(a) (a_1) Contrôle u(t) en trait plein et $u_R(t)$ en pointillé. Le contrôle u(t) est optimisé sans prendre en compte le phénomène de distorsion, pour transférer le système de $|\zeta_0\rangle$ à $|\zeta_1\rangle$. (a_2) Population dans la base $(|\zeta_n\rangle)_{n\in\mathbb{N}}$.



(b) (b_1) Contrôle u(t) en trait plein et $u_R(t)$ en pointillé. Le contrôle u(t) est optimisé en tenant compte du phénomène de distorsion, pour transférer le système de $|\zeta_0\rangle$ à $|\zeta_1\rangle$. (a₂) Population dans la base $(|\zeta_n\rangle)_{n\in\mathbb{N}}$.

FIGURE 4.6 – Propagation de la dynamique avec prise en compte du phénomène de distorsion, pour deux contrôles.

Choix de la fréquence de contrôle. Le contrôle généré par le dispositif expérimental, pour le système Fluxonium, est en fait composé d'une porteuse et d'une enveloppe, que l'on peut écrire comme $u(t) = \tilde{u} \cos (2\pi f)$, avec \tilde{u} l'enveloppe du contrôle et $\cos (2\pi f)$ la porteuse de fréquence $f = \omega/2\pi$. L'enveloppe est échantillonnée avec un pas de T = 0.5 ns et nous notons $\tilde{u} = \tilde{u}_0, \ldots, \tilde{u}_{N-1}$ la discrétisation de celui-ci, et la porteuse est considéré comme un signal continue en temps. L'avantage de ce type de montage est de pouvoir choisir la fréquence du signal de contrôle. Une idée est par exemple de pouvoir choisir un contrôle à une fréquence proche d'une sous-harmonique de la fréquence de résonance f_0 associée aux deux premiers niveaux d'énergie, afin de limiter le phénomène de décohérence [155]. On peut alors généraliser les résultats explicités précédemment dans la section 4.2.1 de l'effet d'une distorsion par le dispositif électronique sur ce type de contrôle. En effet, dans ce cas, nous considérons l'équation différentielle suivante (sur $t \in [0, T]$),

$$\tau \dot{u}_R + u_R = \tilde{u}_0 \cos(\omega t), \tag{4.36}$$

que l'on peut résoudre à l'aide de l'équation complexe correspondante avec $u_R = \Re(V)$. La fonction V satisfait,

$$\tau \dot{V} + V = \tilde{u}_0 e^{i\omega t}.\tag{4.37}$$

Nous posons $V = V_0 e^{i\omega t}$. V_0 est solution de

$$\tau \dot{V}_0 + (1 + \iota \omega \tau) V_0 = \tilde{u}_0. \tag{4.38}$$

La solution générale est donnée par

$$V(t) = \frac{\tilde{u}_0}{1 + \iota\omega\tau} e^{\iota\omega t} + Ae^{-t/\tau}.$$
(4.39)

Finalement, nous déduisons que

$$V(t) = \frac{\tilde{u}_0}{1 + \iota\omega\tau} \left(e^{\iota\omega t} - e^{-t/\tau} \right) + V(0)e^{-t/\tau}$$
(4.40)

$$= \frac{u_0}{1 + \omega^2 \tau^2} (1 - \iota \omega \tau) (\cos(\omega t) + \iota \sin(\omega t) - e^{-t/\tau}) + V(0) e^{-t/\tau}.$$
 (4.41)

ainsi,

$$u_R(t) = \frac{\tilde{u}_0}{1 + \omega^2 \tau^2} (\cos(\omega t) - e^{-t/\tau}) + \frac{\tilde{u}_0 \omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \sin(\omega t) + u_R(0) e^{-t/\tau}$$
(4.42)

$$= \frac{u_0}{1 + \omega^2 \tau^2} \left(\cos(\omega t) + \omega \tau \sin(\omega t) - e^{-t/\tau} \right).$$
(4.43)

La solution complète peut finalement être écrite comme :

$$t \in [t_0, t_1] : u_R(t) = u_1 f(t - t_0)$$

$$t \in [t_1, t_2] : u_R(t) = u_2 f(t - t_1) + u_1 e^{-(t - t_1)/\tau} f(T)$$

$$t \in [t_2, t_3] : u_R(t) = u_3 f(t - t_2) + u_2 e^{-(t - t_2)/\tau} f(T) + u_1 e^{-(t - t_2)/\tau_e - T)/\tau} f(T)$$

...



FIGURE 4.7 – Contrôle optimal pour le transfert de $|\zeta_0\rangle$ à $|\zeta_1\rangle$. (a) Contrôle u(t) non distordu en bleu. En vert la porteuse, en orange l'enveloppe. (b) Signal distordu $u_R(t)$ pour un retard de $\tau = 0.1$ ns. (c) Transformée de Fourier de $y_R(t)$. La fréquence de ce contrôle est proche de la fréquence de résonance f_0 .

avec

$$f(t) = \frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2} \left(\cos(\omega t) + \omega \tau \sin(\omega t) - e^{-t/\tau} \right).$$

$$(4.44)$$

Le nouveau contrôle $u_R(t)$ peut être exprimé comme

$$u_R(t) = \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{u}_k f_k(t)$$
(4.45)

où la fonction $f_k(t)$ est,

$$f_k(t) = \begin{cases} f(t - t_{k-1}) & t \in [t_{k-1}, t_k] \\ e^{-(t - t_k)/\tau} f(T) & t \ge t_k \end{cases}$$
(4.46)

La figure 4.7 montre le résultat pour un contrôle u(t) dont l'enveloppe est positive et constante par morceaux sur un pas de temps de T = 0.5 ns et la porteuse est de fréquence $f_0 = 1.55$ GHz soit la fréquence associée aux deux premiers niveaux d'énergies. Le retard τ est de 0.1 ns. Notons que la fréquence du contrôle de la figure 4.6b est de $f_0/3$. On observe donc que le système utilise une fréquence de contrôle qui est une sous-harmonique de la fréquence naturelle du système. Cet aspect reste à expliquer d'un point de vue théorique. Les simulations numériques servent ici uniquement à illustrer la possibilité de choisir la fréquence du contrôle.

4.3 Conclusion

Pouvoir réaliser des opérations quantiques en temps minimum est primordial pour le développement de technologies quantiques. En effet, la rapidité d'une opération permet d'améliorer la performance de la technologie et également de limiter le phénomène de décohérence. Il est alors possible de réaliser plus d'opérations dans un même temps. Dans ce cadre, il est nécessaire de caractériser le temps minimum pour réaliser une opération en fonction des contraintes expérimentales. Dans ce chapitre, la discrétisation temporelle du contrôle ainsi que la distorsion du contrôle par son passage dans un dispositif électronique sont étudiées.

Nous avons montré qu'il est possible de résoudre le transfert d'état à état en temps minimum pour deux systèmes quantiques à deux niveaux pour des contrôles constants par morceaux. Pour cela nous utilisons une généralisation du PMP à ce type de contrôle. Le temps minimum est étudié en fonction du pas de discrétisation T ou en fonction du nombre de contrôles N.

Nous pouvons illustrer l'impact de la discrétisation temporelle du contrôle sur le temps minimum dans le cas d'une expérience de RMN. Nous considérons le problème du contrôle d'un spin 1/2 décrit en 2.3.1. Nous considérons les paramètres expérimentaux utilisés dans [98], soit une discrétisation temporelle de 0.5 μ s et une amplitude maximale de $\nu = 100$ kHz. Le temps de l'expérience t_{exp} est donné par $t = 2\pi\nu t_{exp}$ où t est le temps normalisé utilisé dans la section 2.3.1. Pour N = 9 et T fixe, le temps minimum est égal à 4.34 μ s, tandis que le temps minimum pour un contrôle continu est égal à 4.33 μ s. Du fait de la convergence exponentielle du temps minimum en fonction de T, nous observons que la différence entre les deux temps est relativement faible même pour un petit nombre N de contrôles.

La prochaine étape consistera à appliquer ce résultat à des systèmes de dimensions supérieures comme le système BEC (3.4) ou le système fluxonium (3.37). La principale difficulté sera probablement l'initialisation de la méthode de tir, étant donné l'augmentation de la dimension. Dans ce cas, il pourrait être intéressant d'utiliser GRAPE pour obtenir une première approximation du temps minimum et de l'état adjoint initial afin d'initialiser la méthode de tir.

Non prise en compte, la distorsion du contrôle par son passage dans un dispositif électronique peut amener le système à dévier de la trajectoire optimale. Nous avons montré qu'il est possible d'étendre la méthode de tir et GRAPE pour en tenir compte. Le système à deux niveaux avec un paramètre de contrôle et le système fluxonium sont étudiés.

Pour le système à deux niveaux, la méthode de tir permet d'étudier le temps minimum en fonction du retard. Les calculs permettent ainsi de donner une estimation du temps minimum pour le transfert de l'état fondamental du réseau au premier état excité dans le cas d'une expérience de qubit fluxonium.

Dans le cas de l'expérience du fluxonium, il a été mis en évidence l'importance du phénomène. La prochaine étape consiste à mettre en œuvre expérimentalement les résultats numériques afin de réaliser des transferts d'état à états variés ou des portes quantique (NOT par exemple) pour réaliser des opérations quantiques.

Généralisation du problème de contrôle optimal d'un condensat de Bose-Einstein

Résumé : L'utilisation du contrôle optimal pour l'expérience BEC a montré qu'il était possible d'atteindre une grande variété d'états d'impulsions pour un condensat de Bose-Einstein [61]. Nous proposons une extension de ces travaux pour approfondir cette problématique.

Dans la perspective de construire un simulateur quantique, il est essentiel de pouvoir stabiliser le système dans un état spécifique [46, 76]. La stabilisation considérée est stroboscopique, c'est à dire que le système atteint l'état à certains instants de manière périodique. Nous montrons qu'il est possible de stabiliser de la sorte le système sur une variété d'états cibles à l'aide du contrôle optimal.

Dans la perspective de créer un calculateur quantique, il est nécessaire de travailler sur la création de porte logique quantique. Le but du contrôle optimal n'est plus d'optimiser le contrôle afin d'atteindre un état cible spécifique, mais une porte, autrement dit un opérateur unitaire. Nous montrons par la suite comment dériver de tels contrôles.

Bien que l'accord théorie et expérience soit très bon, il est possible de l'améliorer en considérant l'interaction entre les atomes du condensat. Dans ce cadre, la dynamique du système n'est plus régie par l'équation de Schrödinger mais par celle de Gross-Pitaevskii. La propagation temporelle du système et l'algorithme GRAPE sont modifiés en conséquence, notamment en utilisant le cadre des bases DVR-FBR. Nous montrons également comment implémenter cette extension.

Finalement, afin de simuler l'Hamiltonien effectif créé par des réseaux cristallins à 2 et 3 dimensions, le réseau optique 1D de l'expérience sera à terme remplacé par un réseau optique 2D. Nous proposons dans ce cadre une extension du modèle présenté dans la section 3.1.1, et montrons qu'il est possible de contrôler le condensat dans un réseau optique 2D.

5.1	Stabilisation stroboscopique		
	5.1.1	Théorie de Floquet	78
	5.1.2	Utilisation du contrôle optimal pour la stabilisation stroboscopique .	79
5.2	Contro	ôle optimal de portes quantiques	80
	5.2.1	Modélisation mathématique et contrôle optimal	80
	5.2.2	Exemple	83

5.3	Contrôle de l'équation de Gross–Pitaevskii				
	5.3.1	Modèle	84		
	5.3.2	Résolution numérique	85		
		GRAPE non-linéaire	88		
	5.3.3	Exemple	89		
5.4	Réseau optique 2D		91		
	5.4.1	Avant-propos	91		
	5.4.2	Modèle	91		
	5.4.3	Problème de contrôle	94		
	5.4.4	Exemple	95		
5.5	Concl	usion	95		

5.1 Stabilisation stroboscopique

La simulation quantique repose sur la capacité à reproduire la dynamique d'un système quantique complexe à partir d'un système quantique plus simple et contrôlable. C'est l'un des objectifs de l'expérience BEC.

Une étape dans la réalisation d'un tel dispositif est de pouvoir stabiliser le système sur un état de manière stroboscopique, c'est à dire que le système se trouve dans cet état périodiquement en temps à une phase près. La stabilisation stroboscopique du système permet la simulation d'Hamiltoniens effectifs [46, 76] ou d'un environnement dissipatif [89].

L'ingénierie de Floquet désigne le domaine de recherche qui consiste à mettre en forme un contrôle permettant de stabiliser le système de manière stroboscopique. Son nom provient de la théorie de Floquet qui étudie l'évolution des systèmes dynamiques périodiques [30]. Dans cette section, nous montrons qu'il est possible de stabiliser stroboscopiquement le système BEC sur une variété d'états, numériquement et expérimentalement [8].

5.1.1 Théorie de Floquet

La théorie de Floquet étudie la dynamique d'un système périodique en temps. Nous présentons ici son application dans le cas d'un système quantique.

Considérons le système quantique suivant,

$$i\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} = \hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle,\tag{5.1}$$

où $|\psi\rangle$ est un vecteur de $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$, et l'Hamiltonien T-périodique,

$$\hat{H}(t+T) = \hat{H}(t).$$
 (5.2)

L'évolution du système est donnée par l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t, 0)$. Le théorème de Floquet indique que cet opérateur d'évolution peut se décomposer tel que,

$$\hat{U}(t,0) = e^{-i\hat{K}_F(t)}e^{-i\hat{H}_F t}.$$
(5.3)

 \hat{H}_F est l'Hamiltonien de Floquet, indépendant du temps, et $\hat{K}_F(t)$ le kick operator, l'Hamiltonien qui décrit la dynamique sur une période, et qui a les propriétés suivantes :

$$\hat{K}_F(t+T) = \hat{K}_F(t) \tag{5.4}$$

 et

$$\hat{K}_F(0) = \hat{I}.\tag{5.5}$$

Ainsi, en utilisant ces propriétés au temps T, l'opérateur d'évolution (ou de Floquet) s'écrit,

$$\hat{U}(T,0) = e^{-i\hat{H}_F T}.$$
(5.6)

La décomposition spectrale de cet opérateur donne,

$$\hat{U}(T,0) |\omega_n\rangle = e^{-i\epsilon_n T} |\omega_n\rangle, \qquad (5.7)$$

où ϵ_n représente les quasi-énergies et $|\omega_n\rangle$ les états de Floquet. L'évolution temporelle d'un état $|\psi\rangle$ ayant pour état initial,

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} c_n |\omega_n\rangle, \qquad (5.8)$$

est donnée par,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} c_n e^{-i\hat{K}_F(t)} e^{-i\hat{H}_F t} |\omega_n\rangle.$$
(5.9)

Au temps mT, et pour $|\psi(0)\rangle = |\omega_k\rangle$, nous obtenons,

$$\left|\psi(mT)\right\rangle = e^{-i\epsilon_k mT} \left|\omega_n\right\rangle. \tag{5.10}$$

Ainsi, au temps mT, l'état retournera sur l'état de Floquet $|\omega_k\rangle$, à un terme de phase près. Il y a donc stabilisation stroboscopique sur l'état $|\omega_k\rangle$.

5.1.2 Utilisation du contrôle optimal pour la stabilisation stroboscopique

Dans ce contexte, il est possible d'utiliser le contrôle optimal pour stabiliser de manière stroboscopique le système. Supposons que l'on souhaite stabiliser stroboscopiquement le système BEC (3.4) sur un état spécifique $|\psi_t\rangle$. Plusieurs étapes sont nécessaires. Une première rampe de contrôle permet d'amener le système de l'état $|0\rangle$ à l'état cible $|\psi_t\rangle$. Puis une deuxième rampe permet de stabiliser le système. En effet, supposons qu'au temps t_0 le système soit dans l'état $|\psi_t\rangle$. Le but est de trouver une rampe de contrôle $\varphi(t)$ telle que $|\psi_t\rangle$ soit un vecteur propre de l'opérateur de Floquet,

$$\hat{U}(T,0) |\psi_t\rangle = e^{\imath \epsilon_k T} |\psi_t\rangle, \qquad (5.11)$$

ce qui assure que le système se T-stabilise sur $|\psi_t\rangle$. L'algorithme GRAPE peut être utilisé pour calculer ce contrôle, avec la minimisation de la fidélité F_1 (2.38),

$$F_1 = 1 - |\langle \psi(T) | \psi_t \rangle|^2 = 1 - \langle \psi_t | \hat{U}(T, 0) | \psi_t \rangle \langle \psi_t | \hat{U}^{\dagger}(T, 0) | \psi_t \rangle.$$
(5.12)

Nous illustrons l'utilisation du contrôle optimal pour la stabilisation du système BEC (3.4) sur l'état gaussien $|g(0,0,0.5)\rangle$ (figure 5.1) et sur les états squeezés $|g(0,\sqrt{s}/2,0.5)\rangle$ et $|g(\pm \pi/2, \pm \sqrt{s}, 0)\rangle$ (figure 5.2).

Ces résultats sont présentés dans l'article [8]. Ils illustrent la très bonne correspondance entre les résultats théoriques/numériques et expérimentaux, pour le cas de la stabilisation stroboscopique sur des temps expérimentaux particulièrement longs.

Nous n'avons présenté ici que l'utilisation du contrôle optimal appliqué à ce processus de stabilisation mais l'article étudie également un mécanisme dit « flip-flop ». La stabilisation stroboscopique est réalisée à l'aide du contrôle de préparation (celui qui amène le système de l'état fondamental du réseau à l'état sur lequel on souhaite le stabiliser) et des symétries de ces états. Le temps minimum pour le transfert du système de $|g(0,0,0.5)\rangle$ sur lui-même est également présenté dans l'article [8], ainsi que la vitesse limite quantique (QSL) [51], qui représente une borne sur le temps du transfert.

5.2 Contrôle optimal de portes quantiques

Un autre aspect de l'expérience BEC est de réaliser un calculateur quantique. Cette foisci, le but est d'utiliser les propriétés quantiques du système de sorte à créer des opérations quantiques. A l'instar de l'informatique classique qui consiste à manipuler l'information par des opérations élémentaires sur des bits (une valeur 0 ou 1), il est possible de créer des opérations sur des qubits (soit l'état d'un système à deux niveaux quantiques qui peut être dans une superposition des états $|f\rangle$ et $|e\rangle$). Dans un système de dimension supérieure d, il est également possible de réaliser des opérations sur des qudits (état d'un système quantique de dimension d) [151].

Une opération est caractérisée par une porte logique quantique. Mathématiquement, une porte est un opérateur qui agit sur un ket afin de le transformer en un autre ket. La succession d'opérations permet le traitement de l'information. Parmi les principales portes, dans le cas d'un système quantique à deux niveaux, on peut citer les portes NOT et Hadamard. Elles sont définies par,

$$\hat{U}_{\rm NOT} = \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{5.13}$$

 et

$$\hat{U}_{\text{HAD}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1\\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$
 (5.14)

La porte NOT transforme l'état $|0\rangle$ en $|1\rangle$ et réciproquement. Elle équivaut à une rotation autour de l'axe e_x de π radians sur la sphère de Bloch. La porte Hadamard, quant à elle représente une rotation de $\pi/2$ par rapport à l'axe e_y puis de π autour de e_x . Ainsi par exemple le ket $|f\rangle$ donnera le ket $1/\sqrt{2}(|e\rangle - |f\rangle)$.

5.2.1 Modélisation mathématique et contrôle optimal

Nous présentons un algorithme pour le contrôle optimal de l'opérateur d'évolution U(t, 0), opérateur unitaire qui donne l'état du système au temps t connaissant l'état au temps initial t_0 . Formellement, un opérateur unitaire est un opérateur linéaire \hat{U} d'un espace de Hilbert \mathcal{H} (considéré ici de dimension finie $d_{\mathcal{H}} = n$), tel que $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{\dagger}$. Le but est de trouver un contrôle permettant de générer une porte souhaitée, soit d'atteindre une porte cible \hat{U}_t à partir d'une



FIGURE 5.1 – Stabilisation stroboscopique à l'aide d'un transfert d'état à état. (a) Le contrôle optimal de la phase $\varphi(t)$ obtenue pour préparer l'état gaussien squeezé à partir de lui-même pour une profondeur s = 5.92 avec une fidélité F > 0.995 pour un temps de contrôle $T = 53.7 \ \mu s.$ (b) (resp. (c)) Évolution numérique (resp. expérimentale) de la distribution en impulsion après préparation de l'état initial, en utilisant la rampe de phase tracée en (a) pour maintenir l'état stroboscopiquement pendant dix périodes dans un réseau de profondeur $s = 6.04 \pm 0.06$. Pour la première période $t/T \in [0,1]$ l'évolution de la distribution en impulsion est détaillée. (d) Représentation de Husimi numérique de l'état squeezé initialement préparé. (e-h) Représentations de Husimi des états stabilisés reconstruits expérimentalement à différents instants. (e) représente l'état initial reconstruit expérimentalement, (f-h) sont les distributions de Husimi reconstruites expérimentalement pour 1, 5 et 10 périodes respectivement.



FIGURE 5.2 – Stabilisations stroboscopiques. (a) Représentation de Husimi numérique d'un état initial gaussien avec un squeezing $\xi = 0.5$ centré en $x_0 = 0, p_0 = \sqrt{s/2}$ dans l'espace de phase, obtenu en utilisant une rampe optimale avec une fidélité F > 0.995, pour s = 5.84. (b) Stabilisation expérimentale correspondante pendant dix périodes ($T = 1.5T_0$), dans un réseau de profondeur $s = 5.84 \pm 0.08$. (c) Représentation de Husimi numérique d'une superposition initiale de deux états gaussiens non-squeezés centrés en $x_0 = \pm \pi/2, p_0 = \pm \sqrt{s}$ dans l'espace de phase, obtenue en utilisant une rampe optimale avec une fidélité F > 0.995, pour s = 5.8. (d) Stabilisation expérimentale correspondante pendant dix périodes ($T = 0.86T_0$), dans un réseau de profondeur $s = 5.8 \pm 0.07$.

porte initiale $\hat{U}(t=0) = \hat{U}_0 = \hat{I}$ [118, 119, 133]. L'opérateur d'évolution $\hat{U}(t)$ est solution de l'équation,

$$i\frac{dU(t)}{dt} = \hat{H}\hat{U}(t), \qquad (5.15)$$

avec \hat{H} , l'Hamiltonien du système, qui dépend d'un paramètre de contrôle u(t). Soient \hat{V} et \hat{U} deux opérateurs unitaires. Sur l'espace vectoriel des matrices de taille $n \times n$ à coefficients dans \mathbb{C} , $\mathcal{M}_n(\mathbb{C})$, le produit scalaire (produit scalaire de Frobenius) est défini par : $\left\langle \hat{V} \middle| \hat{U} \right\rangle = \frac{1}{n} \operatorname{Tr} \left(\hat{V}^{\dagger} \hat{U} \right)$; de norme associée (norme de Frobenius ou de Hilbert-Schmidt), $\|\hat{U}\|^2 = \operatorname{Tr} \left(\hat{U}^{\dagger} \hat{U} \right)$. Le coefficient 1/n est un coefficient de normalisation. En effet, \hat{U} étant unitaire, nous avons $\left\langle \hat{U} \middle| \hat{U} \right\rangle = \frac{1}{n} \operatorname{Tr} \left(\hat{U}^{\dagger} \hat{U} \right) = \frac{1}{n} \operatorname{Tr} \left(\hat{U}^{\dagger} \hat{U} \right) = \frac{1}{n} \operatorname{Tr} \left(\hat{I} \right) = 1$. Nous cherchons donc un contrôle $u(t) \in \mathbb{R}$ qui minimise le coût F équivalent au coût F_1 (2.38) pour les kets,

$$F = \left| \left\langle \hat{U}_t \middle| \hat{U}(t_f) \right\rangle \right|^2 = \frac{1}{n^2} \left| \operatorname{Tr} \left(\hat{U}_t^{\dagger} \hat{U}(t_f) \right) \right|^2.$$
(5.16)

Nous appliquons alors le Principe du Maximum de Pontryagin (PMP). L'Hamiltonien de contrôle est défini par,

$$H_p = \Im \left[\left\langle \hat{V} \middle| \hat{H} \middle| \hat{U} \right\rangle \right], \tag{5.17}$$

où \hat{V} est l'état adjoint, solution de,

$$i\frac{d\hat{V}(t)}{dt} = \hat{H}\hat{V}(t).$$
(5.18)

La condition du maximum est donnée par $\frac{\partial H_p}{\partial \varphi} = 0$, soit,

$$\Im\left[\left\langle \hat{V} \middle| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \varphi} \middle| \hat{U} \right\rangle\right] = 0.$$
(5.19)

Le PMP donne également la condition de transversalité suivante,

$$\hat{V}(t_f) = \left\langle \hat{U}_t \middle| \hat{U}(t_f) \right\rangle \hat{U}_t = \frac{1}{n} \operatorname{Tr} \left(\hat{U}_t^{\dagger} \hat{U}(t_f) \right) \hat{U}_t.$$
(5.20)

L'algorithme consiste à propager l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t)$ en avant depuis la condition initiale, en arrière $\hat{V}(t)$ depuis la condition (5.20), puis à mettre à jour le contrôle par $u^{k+1} = u^k - \epsilon \Im \left[\left\langle \hat{V} \middle| \frac{\partial \hat{H}}{\partial u} \middle| \hat{U} \right\rangle \right]$.

5.2.2 Exemple

Nous traitons ici l'exemple de la génération d'une porte de dimension n = 3,

$$\hat{U}_t = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
(5.21)





(b) Opérateur $\hat{U}(t_f)$. Les cercles correspondent aux éléments de $\hat{U}(t_f)$ différents de zéro. La couleur correspond à l'argument de chaque élément.

FIGURE 5.3 – Contrôle optimal pour la génération de la porte U_t (5.21).

dans la base $(|-1\rangle, |0\rangle, |1\rangle)$ (d'un système BEC). Ici n = 3, cependant la simulation numérique utilise un espace de dimension supérieure N = 11, le système réel étant de dimension infinie. Les paramètres sont fixés à $t_f = 500 \ \mu s$, s = 5, q = 0. Cet exemple montre l'intérêt du système BEC pour le calcul quantique via des qutrits.

La figure 5.3 montre le contrôle en phase associé pour un tel transfert et la porte, en terme de population et de phase, à la fin du transfert.

5.3 Contrôle de l'équation de Gross-Pitaevskii

Bien que les expériences montrent un excellent accord théorie expérience à partir du modèle (3.4), il serait possible de l'améliorer davantage en considérant un modèle différent. En effet, jusqu'à maintenant les interactions entre les atomes du condensat sont négligées du fait de la faible densité du condensat. Cependant, la modélisation du phénomène est possible par l'utilisation de l'équation de Gross-Pitaevskii (ou Schrödinger non-linéaire) [50]. Dans l'approximation de champ moyen, l'interaction entre les atomes du condensat est représentée par un terme additionnel dans l'Hamiltonien (3.4), proportionnel au module carré de la fonction d'onde $\psi(x, t)$.

Ce terme supplémentaire rend la résolution numérique du problème plus complexe. En effet, il n'est pas possible de donner une expression analytique de la matrice du terme d'interaction entre les atomes dans la base $(|\phi_{q+n}\rangle)_{n\in\mathbb{Z}}$.

Nous présentons dans cette section une méthode numérique efficace qui permet de propager rapidement la dynamique, en tenant compte des interactions entre les atomes du condensat et rend possible l'application d'un algorithme de contrôle optimal [91].

5.3.1 Modèle

Reprenons l'équation (3.4) adimensionnée qui modélise la dynamique du condensat de Bose-Einstein, en représentation position. L'interaction entre les atomes du condensat se traduit par l'ajout d'un terme non-linéaire $|\psi|^2$ qui mène à l'équation de Gross–Pitaevskii,

Dynamique : Équation de Gross–Pitaevskii

$$i\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{s}{2}\cos\left(x + \varphi(t)\right) + \beta|\psi(x,t)|^2\right)\psi(x,t).$$
(5.22)

 β est le coefficient de non-linéarité sans dimension. Expérimentalement, pour les expériences considérées, sa valeur est de l'ordre de $0.5\pm0.2.$

Dans ce cadre, en utilisant la décomposition de l'état $|\psi\rangle$ sur les états propres de l'opérateur impulsion $|\psi\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} c_{q,n} |\phi_{q+n}\rangle$, il est possible de calculer le terme $|\psi|^2$ en représentation position,

$$|\psi|^{2} = \psi(x,t)^{*}\psi(x,t) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m\in\mathbb{Z}}c_{q,m}^{*}e^{-i(q+m)x}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{l\in\mathbb{Z}}c_{q,l}e^{i(q+l)x}\right)$$
(5.23)
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m\in\mathbb{Z}}c_{q,m}^{*}e^{i(q+l-m)x}.$$
(5.24)

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{m,l \in \mathbb{Z}} c_{q,m}^* c_{q,l} e^{i(q+l-m)x}.$$
 (5.24)

On obtient ainsi la dynamique des coefficients $c_{q,n}$,

$$i\dot{c}_{q,n} = (n+q)^2 c_{q,n} - \frac{s}{4} \left(e^{i\varphi(t)} c_{q,n-1} + e^{-i\varphi(t)} c_{q,n+1} \right) + \frac{\beta}{2\pi} \sum_{m,l \in \mathbb{Z}} c_{q,m}^* c_{q,l} c_{q,n+m-l}.$$
 (5.25)

Contrairement à l'équation de Schrödinger (3.7), il n'est pas possible ici de donner une représentation matricielle analytique au problème. Dans ce cas, l'avantage est que l'on peut utiliser une méthode d'exponentielle de matrice pour propager la dynamique.

Il est toutefois possible de propager la dynamique (5.25) à l'aide d'une méthode RK4 par exemple. Cependant, pour des systèmes de grandes dimensions, la propagation numérique avec une telle méthode peut s'avérer très couteuse en temps de calcul. Typiquement une propagation de l'équation (5.25) prend environ 15 secondes, pour un contrôle constant $\varphi(t) =$ 0 (figure 5.4). Le contrôle optimal, qui nécessite une centaine de propagations, est alors peu envisageable. En effet, pour une centaine de propagations avant et arrière, cela représenterait un calcul d'environ 50 minutes. Durant ce temps, les paramètres expérimentaux, qui sont calibrés avant de commencer l'expérience, peuvent changer significativement et rendre le contrôle inutilisable. Il est par conséquent nécessaire de trouver une autre méthode pour calculer numériquement la propagation du système.

5.3.2 Résolution numérique

Une méthode efficace qui permet d'exprimer le terme non linéaire de (5.22) sous forme matricielle, est la méthode des bases DVR-FBR, ou méthode pseudo-spectrale [82].

La méthode des bases FBR-DVR consiste à utiliser deux bases pour la représentations matricielle des opérateurs. La base FBR (pour Finite Basis Representation) correspond à la base formée par les états propres $|\phi_{q+n}\rangle$ de l'opérateur impulsion. Dans cette base il est possible d'exprimer les opérateurs \hat{p} et $\cos(\hat{x})$. La base DVR (pour Discrete Variable Representation) quant à elle correspond à une base issue de la discrétisation d'un paramètre continu, ici la position. Dans cette base, il est possible de donner la représentation matricielle du terme non linéaire $|\psi(x,t)|^2$. Une transformation unitaire permet le passage d'une base à l'autre, et donc d'exprimer tous les opérateurs dans la base FBR par exemple. La propagation du système est alors possible par exponentielle de matrice.

Appliquons cette méthode au cas de l'équation (5.22). La base FBR correspond à la base formée par les états propres $|\phi_{q+n}\rangle$ de l'opérateur impulsion. Dans cette base, il est possible d'exprimer les opérateurs \hat{p} et $\cos(\hat{x})$. Puisque numériquement nous travaillons dans un sous-espace \mathcal{H}_N de \mathcal{H} de dimension finie $N = 2n_{\max} + 1$, avec $n_{\max} \in \mathbb{N}$ et $n \in \{n \in \mathbb{Z}, -n_{\max} \leq n \leq n_{\max}\}$, la base est finie, de dimension N.

Le potentiel est spatialement périodique, ainsi la variable de position x appartient à l'intervalle $[0, 2\pi]$. En représentation position, le produit scalaire de deux fonctions $\phi_{q+n}(x)$ s'exprime de la manière suivante,

$$\langle \phi_{q+m} | \phi_{q+n} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(q+m)x} e^{i(q+n)x} dx = \delta_{m,n}.$$
 (5.26)

La base DVR est construite à partir de la discrétisation de la variable position $x \in [0, 2\pi]$, telle que,

$$x_j = \frac{2\pi}{N}j, \ c_j = \sqrt{\frac{2\pi}{N}}$$
(5.27)

avec $j \in \{j \in \mathbb{N}, 0 \le j < N\}$. Les coefficients c_j représentent une pondération associée à chaque point x_j . Une quadrature est définie par,

$$\forall \Psi, \Phi \in \mathcal{H}_N, \ \int_0^{2\pi} \Psi^*(x) \Phi(x) d\tilde{x} = \sum_{j=0}^{N-1} |c_j|^2 \Psi^*(x_j) \Phi(x_j).$$
(5.28)

D'après (5.26), nous avons donc,

$$\sum_{j=0}^{N-1} |c_j|^2 \phi_{q+m}^*(x_j) \phi_{q+n}(x_j) = \delta_{m,n}$$
(5.29)

et,

$$c_i c_j^* \sum_{n=-n_{\max}}^{n_{\max}} \phi_{q+n}(x_i) \phi_{q+n}^*(x_j) = \delta_{i,j}.$$
(5.30)

Nous définissons alors la matrice \hat{R} ,

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} R_{0,-n_{\max}} & R_{0,-n_{\max}+1} & \dots \\ \vdots & \ddots & \\ R_{N-1,-n_{\max}} & R_{N-1,n_{\max}} \end{pmatrix},$$
(5.31)

avec $R_{j,n} = c_j \phi_{q+n}(x_j)$. D'après (5.27), les éléments de matrice $R_{j,n}$ sont,

$$R_{j,n} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\frac{2\pi}{N}(q+n)j}.$$
(5.32)

Les relations (5.29) et (5.30) sont alors équivalentes à $\hat{R}^{\dagger}\hat{R} = \hat{I}$ et $\hat{R}\hat{R}^{\dagger} = \hat{I}$. La matrice de passage \hat{R} est donc une matrice unitaire. La base DVR, $(|u_j\rangle)_{j \in [0,N-1]}$, est alors construite telle que,

$$|u_j\rangle = \sum_{n=n_{\text{max}}}^{n_{\text{max}}} \hat{R}_{jn}^* |\phi_n\rangle.$$
(5.33)

Elle associe une base de \mathcal{H}_N à la discrétisation spatiale. Ainsi, un opérateur \hat{W} dépendant de x, aura une représentation diagonale dans la base DVR,

$$\langle u_i | W | u_j \rangle \simeq W(x_j) \delta_{i,j}.$$
 (5.34)

La matrice \hat{R} permet le passage de la base DVR à FBR,

$$\hat{W}^{FBR} = \hat{R}^{\dagger} \hat{W}^{DVR} \hat{R}. \tag{5.35}$$

Sachant que le module carré de la fonction d'onde $|\psi|^2$ dépend de la position x (5.25), il est possible d'exprimer sa représentation matricielle dans la base DVR, puis dans la base FBR. La méthode de l'exponentielle de matrice peut être utilisée pour propager la dynamique. En effet, notons \hat{G}^{DVR} la représentation matricielle de $|\psi|^2$ dans la base DVR,

$$\hat{G}^{DVR} = \begin{pmatrix} G_0 & & & \\ & G_1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & G_{N-1} \end{pmatrix},$$
(5.36)

où,

$$G_j = \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-n_{\text{max}}}^{n_{\text{max}}} c_{q,n} e^{i \frac{2\pi}{N} (q+n)j} \right|^2.$$
(5.37)

Les paramètres $c_{q,n}$ sont les coefficients de l'état dans la base FBR, au temps t. En utilisant les notations introduites dans la section 3.1.1 et les relations (5.31) et (5.36), l'équation (5.22) peut s'écrire sous forme matricielle dans la base FBR,

$$i\frac{d\left|\psi\right\rangle}{dt} = \hat{H}_{GP}\left|\psi\right\rangle = \left(\hat{H}_{0} + \cos(\varphi(t))\hat{H}_{1} + \sin(\varphi(t))\hat{H}_{2} + \beta\hat{R}^{\dagger}\hat{G}^{DVR}\hat{R}\right)\left|\psi\right\rangle, \qquad (5.38)$$

avec \hat{H}_{GP} l'Hamiltonien de Gross-Pitaevskii. On peut ainsi résoudre (5.38) par une méthode d'exponentielle de matrice introduite dans la section 2.3.2, pour un pas de temps suffisamment petit, telle que,

$$|\psi(t_{n+1})\rangle = \hat{U}_n |\psi(t_n)\rangle, \qquad (5.39)$$

avec $\hat{U}_n = e^{i\hat{H}_{GP}(t_n)T}$.

A titre de comparaison, la propagation pour un contrôle constant est ici de l'ordre de 0.6 secondes. Soit un temps total de calcul d'environ 2 minutes. La figure 5.4 montre l'évolution de la projection de de l'état $|\psi\rangle$ sur l'état $|\phi_{0+0}\rangle$ en fonction du temps, calculée par la méthode d'exponentielle de matrice et par une méthode RK4. L'état initial est l'état squeezé $|g(0,0,1/2)\rangle$ et le contrôle en phase est nul $\varphi(t) = 0$. Pour $\beta = 1$, on remarque que les deux méthodes donnent le même résultat.

L'application d'une extension de GRAPE à l'équation de Gross-Pitaevskii est alors envisageable.



FIGURE 5.4 – Projection de l'état $|\psi\rangle$ sur l'état $|\phi_{0+0}\rangle$ en fonction du temps, pour un contrôle nul $\varphi = 0$ et à partir de l'état initial $|\psi\rangle = |g(0,0,1/2)\rangle$. En orange et bleu, propagation calculée avec une méthode d'exponentielle de matrice, pour $\beta = 0$ et $\beta = 1$ respectivement. En pointillé noir avec une méthode RK4 pour $\beta = 1$.

GRAPE non-linéaire

Nous présentons ici l'application du PMP à l'équation de Gross-Pitaevskii. Une solution est trouvée par un algorithme du gradient que nous nommons GRAPE non-linéaire.

Considérons le cas d'un transfert d'état à état avec la fidélité F_1 (2.38), suivant la dynamique (5.22).

L'application du PMP donne l'Hamiltonien de contrôle,

$$H_p = \Im \left\langle \chi | \hat{H}_{GP} | \psi \right\rangle, \tag{5.40}$$

avec \hat{H} , l'Hamiltonien de Gross-Pitaevskii en représentation position,

$$\hat{H}_{GP} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{s}{2}\cos\left(x + \varphi(t)\right) + \beta|\psi(x,t)|^2.$$
(5.41)

L'évolution de l'état adjoint est donnée par la relation, $\dot{\chi}(x,t) = -\partial_{\psi}H_p$,

$$i\frac{\partial\chi}{\partial t} = \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{s}{2}\cos\left(x + \varphi(t)\right) + 2\beta\left|\psi\right|^2\right)\chi - \beta\psi^2\chi^*.$$
(5.42)

La condition de transversalité sur l'état adjoint $\chi(x, t_f) = \chi_0 \partial_{\psi} F_1$ donne,

$$\chi(x, t_f) = -2\chi_0 \langle \psi_t | \psi(t_f) \rangle \psi_t, \qquad (5.43)$$

avec $\chi_0 = -1/2$. Finalement la condition de maximisation de l'Hamiltonien de contrôle, $\frac{\partial H_p}{\partial \varphi} = 0$, donne,

$$\Im \langle \chi | \frac{\partial \dot{H}_{GP}}{\partial \varphi} | \psi \rangle = 0.$$
(5.44)

Le contrôle optimal est trouvé à l'aide du schéma (2.71). Il faut propager en avant l'état $|\psi\rangle$ et en arrière l'état adjoint $|\chi\rangle$. Pour ce dernier, il est possible de réexprimer sa dynamique (5.45) telle que,

$$i\frac{\partial\chi}{\partial t} = \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{s}{2}\cos(x+\varphi(t)) + \beta\left|\psi\right|^2\right)\chi - 2i\beta\Im(\chi^*\psi)\psi.$$
(5.45)

On peut ainsi le propager en arrière, depuis les conditions $|\psi(t_f)\rangle = |\psi_f\rangle$ et $|\chi(t_f)\rangle = \langle \psi_t | \psi(\tau_f) \rangle | \psi_t \rangle$, à l'aide du système étendu sous forme matricielle,

$$\imath \begin{pmatrix} |\dot{\psi}\rangle \\ |\dot{\chi}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{GP} & 0\\ -2\imath\beta \hat{R}^{\dagger} \hat{I}^{DVR} \hat{R} & \hat{H}_{GP} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi\rangle \\ |\chi\rangle \end{pmatrix},$$
(5.46)

avec \hat{H}_{GP} l'Hamiltonien de Gross-Pitaevskii sous forme matricielle (5.38), et \hat{I}^{DVR} la matrice diagonale associée au terme $\Im(\chi^*\psi)$, dans la base DVR. Les éléments de matrice de \hat{I}^{DVR} sont, $I_j = \Im\left(\frac{1}{2\pi}\sum_{m,n} d_{q,m}^* c_{q,n} e^{i\frac{2\pi}{N}(q+n-m)j}\right)$, en notant $d_{q,n}$ les coefficients de l'état adjoint $|\chi\rangle$ dans la base FBR, et avec n et m variant de $-n_{\max}$ à n_{\max} .

5.3.3 Exemple

Considérons le transfert du système de $|\psi(0)\rangle = |\phi_{0+0}\rangle$ à l'état squeezé $|g(0,0,3/2)\rangle$. Le temps de contrôle est fixé à $t_f = 150 \ \mu s$, la profondeur du réseau à s = 5, et le quasi-moment à q = 0. Un premier contrôle est optimisé pour $\beta = 0$ (figure 5.5a). La dynamique est ensuite propagée avec ce contrôle pour un coefficient de linéarité variant de 0 à 1, $\beta \in [0, 1]$. La figure 5.6a montre en bleu l'évolution de $1 - F_1$ en fonction de β . La zone grise sur la figure représente l'incertitude sur la valeur de β pour ce type de transfert. On remarque que pour $\beta = 0.7$, la borne supérieure de l'intervalle d'incertitude, la fidélité n'est plus que de $1 - F_1 = 0.93$. Ainsi, le système n'atteint plus l'état cible.

Un deuxième contrôle est optimisé à l'aide de la généralisation de GRAPE dans le cas de l'équation de Gross-Pitaevskii. La fidélité atteinte est de $1 - F_1 = 0.994$ (figure 5.6a), et permet le transfert du système à l'état cible. La figure 5.5b montre la population de l'état cible $|g(0,0,3/2)\rangle$ en bleu, de l'état final pour le contrôle optimisé avec $\beta = 0.7$ en vert et de l'état final pour le contrôle optimisé avec $\beta = 0.7$

Notons qu'en fonction des transferts, la dynamique peut ne présenter qu'une légère variation par rapport au cas sans interaction entre les atomes du condensat. C'est le cas pour les contrôles présentés dans la section 3.1.1. La fidélité de ce transfert est également tracée en fonction de β sur la figure 5.6.





(b) Population au temps final. La population bleue correspond à l'état cible $|g(0,0,3/2)\rangle$.

(a) Contrôle optimal en fonction du temps.

FIGURE 5.5 – Propagation de la dynamique pour $\beta = 0.7$. En rouge pour un contrôle optimisé pour $\beta = 0$ et en vert pour $\beta = 0.7$.



(a) Le trait rouge pointillé correspond à la fidélité pour l'état cible $|g(0,0,3/2)\rangle$ et $\beta =$ 0.7, obtenue pour un contrôle optimisé pour $\beta = 0$, soit $1 - F_1 = 0.93$. Le trait vert pointillé correspond à la fidélité pour $\beta = 0.7$ obtenue pour un contrôle optimisé pour $\beta = 0.7$, soit $1 - F_1 = 0.994$.



(b) Fidélité, en fonction de β pour les exemples de la section 3.1.1. Les contrôles utilisés pour la propagation sont optimisés pour $\beta = 0$. En trait rouge plein pour le transfert à l'état $|\phi_{0+2}\rangle$, en trait vert pointillé pour le transfert à $|g(0,0,1)\rangle$ et en trait bleu tiret pour le transfert à $|g(0,0,1/3)\rangle$.

FIGURE 5.6 – Fidélité en fonction de β , calculée pour un contrôle optimisé pour $\beta = 0$. La zone grise correspond à l'incertitude expérimentale sur le paramètre β .

5.4 Réseau optique 2D

5.4.1 Avant-propos

À terme, le réseau optique 1D de l'expérience sera étendu à un réseau optique 2D [61]. Cela permettra de simuler des Hamiltoniens effectifs, comme ceux des réseaux cristallins ou d'étudier le phénomène de localisation d'Anderson dans un réseau 2D. Pour anticiper ce nouveau dispositif, il est pertinent de le modéliser dès maintenant.

Avant de présenter la modélisation d'une expérience avec un réseau 2D, il peut être utile d'introduire le concept de réseaux direct et réciproque, ainsi que le théorème de Bloch dans le cas multidimensionnel [45]. Le réseau direct est un ensemble de vecteurs, qui permet de caractériser les nœuds du réseau, soit les points de l'espace où le potentiel est maximum. On note a_i les vecteurs de base du réseau direct et N la dimension du réseau considéré. Un nœud est un élément de l'ensemble,

$$\mathcal{D} = \left\{ \sum_{i=1}^{N} j_N \boldsymbol{a}_N, \ j_N \in \mathbb{Z} \right\}.$$
(5.47)

Le réseau réciproque est décrit par l'ensemble,

$$\mathcal{R} = \left\{ \sum_{i=1}^{N} j_N \boldsymbol{b}_N, \ j_N \in \mathbb{Z} \right\}$$
(5.48)

où les vecteurs \boldsymbol{b}_i sont construits par définition à partir de la relation,

$$\exp(\imath \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}) = 1, \tag{5.49}$$

avec $\boldsymbol{a} \in \mathcal{D}$ et $\boldsymbol{b} \in \mathcal{R}$. Dans ce cadre, le théorème de Bloch stipule que la fonction d'onde $\psi(\boldsymbol{r},t)$ où $\boldsymbol{r} = \sum_{i=1}^{N} r_i \boldsymbol{a}$ désigne la position de la particule dans l'espace, dont la dynamique est décrite par l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2} + V(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r},t),\tag{5.50}$$

où le potentiel est spatialement périodique tel que $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$ pour tout $\mathbf{R} \in \mathcal{D}$, peut se mettre sous la forme,

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}u(\boldsymbol{r}),\tag{5.51}$$

où $\boldsymbol{q} = \sum_{i=1}^{N} q_i \boldsymbol{b}$ est le quasi-moment multidimensionnel et $u(\boldsymbol{r})$ une fonction périodique dans \mathcal{D} .

5.4.2 Modèle

Comme nous l'avons vu au chapitre 3.1.1, un réseau optique 1D est créé par la superposition de deux lasers. De la même manière, un réseau optique 2D est créé par la superposition de trois lasers ou plus. Considérons la configuration suivante : trois lasers de même pulsation ω qui se propagent dans le plan $(0, \boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y)$ du référentiel du laboratoire; avec une polarisation rectiligne selon l'axe z (figure 5.7). Les vecteurs d'ondes sont définis par :

$$k_1 = k(1,0) \tag{5.52}$$

$$\boldsymbol{k}_2 = \frac{k}{2}(-1,\sqrt{3}) \tag{5.53}$$

$$\mathbf{k}_3 = -\frac{k}{2}(1,\sqrt{3}),\tag{5.54}$$

avec k le nombre d'onde. L'angle entre ces vecteurs est de $2\pi/3$ (figure 5.7). Le champ électrique total résultant est :

$$\boldsymbol{E} = E_0 \sum_{i} \cos\left(\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \varphi_i\right) \boldsymbol{e}_z, \qquad (5.55)$$

où E_0 est l'amplitude du champ électrique, \boldsymbol{r} le vecteur position et φ_i est la phase du $i^{\text{ème}}$ laser, avec i = 1, 2, 3. L'interaction du champ électrique avec l'atome est décrite par l'Hamiltonien d'interaction $\hat{H}_I = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{E}$, où $\boldsymbol{\mu}$ est le moment dipolaire induit. Au premier ordre, le moment dipolaire est $\boldsymbol{\mu} = -\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{E}$. Par conséquent l'Hamiltonien d'interaction est donné par $\hat{H}_I = -\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{E}$. Le champ électrique n'est pas résonant avec les fréquences de transition de l'atome, et la période associée à la pulsation ω est très inférieure au temps caractéristique de l'expérience, T_{dyn} . Il est ainsi possible de moyenner l'Hamiltonien d'interaction pour ne considérer que la dynamique au temps long. Dans ce cadre, le potentiel subit par le BEC est le suivant,

$$V = \langle \hat{H}_I \rangle = -\frac{3}{4} \alpha E_0^2 - \frac{\alpha}{2} E_0^2 \left[\cos\left((\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_2) \cdot \boldsymbol{r} + \varphi_{12} \right) + \cos\left((\boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_3) \cdot \boldsymbol{r} + \varphi_{23} \right) + \cos\left((\boldsymbol{k}_3 - \boldsymbol{k}_1) \cdot \boldsymbol{r} + \varphi_{31} \right) \right],$$
(5.56)

où α est la polarisabilité de l'atome, $\varphi_{jk} = \varphi_j - \varphi_k$, et $\langle \cdot \rangle$ désigne la moyenne temporelle sur une période τ , telle que $\frac{2\pi}{\omega} \gg \tau \gg T_{dyn}$. Au final, le condensat suit le dynamique (5.50) en 2D, avec $\mathbf{r} = (x, y)$.

Dans cette situation, les nœuds du réseau direct correspondent aux maxima d'énergie du potentiel pour $\varphi_{jk} = 0$. Soit,

$$(\mathbf{k}_{1} - \mathbf{k}_{2}) \cdot \mathbf{r} = 0 \ [2\pi] (\mathbf{k}_{2} - \mathbf{k}_{3}) \cdot \mathbf{r} = 0 \ [2\pi] (\mathbf{k}_{3} - \mathbf{k}_{1}) \cdot \mathbf{r} = 0 \ [2\pi]$$
 (5.57)

Ainsi un nœud du réseau direct appartient à l'ensemble \mathcal{D} (5.47) avec,

$$\boldsymbol{a}_1 = -\frac{4\pi}{3k^2}\boldsymbol{k}_3,\tag{5.58}$$

$$\boldsymbol{a}_2 = \frac{4\pi}{3k^2} \boldsymbol{k}_2. \tag{5.59}$$

Un nœud du réseau réciproque appartient à l'ensemble \mathcal{R} (5.49) avec,

$$b_1 = k_1 - k_3,$$
 (5.60)

$$b_2 = k_2 - k_1.$$
 (5.61)



FIGURE 5.7 – Représentation graphique de la configuration des lasers pour créer un réseau optique 2D dans lequel est piégé le condensat.

Nous observons que le potentiel est bien périodique puisque $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$. Dans ce cadre le théorème de Bloch indique que l'état peut se décomposer comme (5.51). La fonction $u(\mathbf{r})$ peut se décomposer en série de Fourier, et la fonction d'onde prend la forme,

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_{m,n\in\mathbb{Z}} c_{\mathbf{q},m,n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{i(m\mathbf{b}_1 + n\mathbf{b}_2)\cdot\mathbf{r}}.$$
(5.62)

On note $\phi_{m,n} = e^{i(m\mathbf{b}_1 + n\mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r}}$ les fonctions de la base de Fourier. Les coefficients $c_{\mathbf{q},m,n}$ sont les coefficients de l'état dans cette base. Afin de simplifier le cadre de l'étude, nous utilisons un quasi-moment nul qui est une bonne approximation expérimentale. En injectant l'expression de $\psi(\mathbf{r}, t)$ précédemment trouvée (5.62) dans l'équation (5.50), nous obtenons la dynamique,

$$i\hbar \sum_{m,n\in\mathbb{Z}} \dot{c}_{m,n} e^{i(m\mathbf{b}_{1}+n\mathbf{b}_{2})\mathbf{r}} = \sum_{m,n\in\mathbb{Z}} \frac{\hbar^{2}}{2m} c_{m,n} (m\mathbf{b}_{1}+n\mathbf{b}_{2})^{2} e^{i(m\mathbf{b}_{1}+n\mathbf{b}_{2})\mathbf{r}} - \sum_{m,n\in\mathbb{Z}} \frac{s}{4} c_{m,n} \left[e^{i((\mathbf{k}_{1}-\mathbf{k}_{2})\cdot\mathbf{r}+\varphi_{12})} e^{i(m\mathbf{b}_{1}+n\mathbf{b}_{2})\mathbf{r}} + e^{-i((\mathbf{k}_{1}-\mathbf{k}_{2})\cdot\mathbf{r}+\varphi_{12})} e^{i(m\mathbf{b}_{1}+n\mathbf{b}_{2})\mathbf{r}} \right] - \sum_{m,n\in\mathbb{Z}} \frac{s}{4} c_{m,n} \left[e^{i((\mathbf{k}_{2}-\mathbf{k}_{3})\cdot\mathbf{r}+\varphi_{23})} e^{i(m\mathbf{b}_{1}+n\mathbf{b}_{2})\mathbf{r}} + e^{-i((\mathbf{k}_{2}-\mathbf{k}_{3})\cdot\mathbf{r}+\varphi_{23})} e^{i(m\mathbf{b}_{1}+n\mathbf{b}_{2})\mathbf{r}} \right] - \sum_{m,n\in\mathbb{Z}} \frac{s}{4} c_{m,n} \left[e^{i((\mathbf{k}_{3}-\mathbf{k}_{1})\cdot\mathbf{r}+\varphi_{31})} e^{i(m\mathbf{b}_{1}+n\mathbf{b}_{2})\mathbf{r}} + e^{-i((\mathbf{k}_{3}-\mathbf{k}_{1})\cdot\mathbf{r}+\varphi_{31})} e^{i(m\mathbf{b}_{1}+n\mathbf{b}_{2})\mathbf{r}} \right]$$
(5.63)

où le terme constant $-\frac{3}{4}\alpha E_0^2$ du potentiel V est négligé, et où l'on pose $s = \alpha E_0^2$, la profondeur du réseau. A partir des relations, $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = -\mathbf{b}_2$, $\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$, $\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1 = -\mathbf{b}_1$,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{b}_{1} \cdot \boldsymbol{b}_{1} &= \boldsymbol{b}_{2} \cdot \boldsymbol{b}_{2} = 3k^{2} \text{ et } \boldsymbol{b}_{1} \cdot \boldsymbol{b}_{2} = -\frac{3}{2}k^{2}, \text{ nous obtenons,} \\ i\hbar \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} \dot{c}_{m,n} e^{i(m\boldsymbol{b}_{1}+n\boldsymbol{b}_{2})\boldsymbol{r}} &= \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} \frac{3k^{2}\hbar^{2}}{2m} c_{m,n} (m^{2}+n^{2}-mn) e^{i(m\boldsymbol{b}_{1}+n\boldsymbol{b}_{2})\boldsymbol{r}} \\ &- \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} \frac{s}{4} c_{m,n} \left[e^{i\varphi_{12}} e^{i(m\boldsymbol{b}_{1}+(n-1)\boldsymbol{b}_{2})\boldsymbol{r}} + e^{-i\varphi_{12}} e^{i(m\boldsymbol{b}_{1}+(n+1)\boldsymbol{b}_{2})\boldsymbol{r}} \right] \\ &- \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} \frac{s}{4} c_{m,n} \left[e^{i\varphi_{23}} e^{i((m+1)\boldsymbol{b}_{1}+(n+1)\boldsymbol{b}_{2})\boldsymbol{r}} + e^{-i\varphi_{23}} e^{i((m-1)\boldsymbol{b}_{1}+(n-1)\boldsymbol{b}_{2})\boldsymbol{r}} \right] \\ &- \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} \frac{s}{4} c_{m,n} \left[e^{i\varphi_{31}} e^{i((m-1)\boldsymbol{b}_{1}+n\boldsymbol{b}_{2})\boldsymbol{r}} + e^{-i\varphi_{31}} e^{i((m+1)\boldsymbol{b}_{1}+n\boldsymbol{b}_{2})\boldsymbol{r}} \right]. \end{aligned}$$

$$(5.64)$$

La projection de cette équation sur l'état $\phi_{m,n}$ et l'introduction du temps adimensionné $\tau = \frac{3\hbar k^2}{2m}t$, donne la dynamique des coefficients $c_{m,n}$,

$$i\dot{c}_{m,n} = (m^2 + n^2 - mn)c_{m,n} - \frac{s}{4} \left[e^{i\varphi_{12}} c_{m,n+1} + e^{-i\varphi_{12}} c_{m,n-1} + e^{i\varphi_{23}} c_{m-1,n-1} + e^{-i\varphi_{23}} c_{m+1,n+1} + e^{i\varphi_{31}} c_{m+1,n} + e^{-i\varphi_{31}} c_{m-1,n} \right].$$
(5.65)

5.4.3 Problème de contrôle

Il est possible de mettre l'équation (5.65) sous forme matricielle. En effet, considérons l'arrangement suivant pour les coefficients de l'état $|\psi\rangle$ dans la base $|\phi_{m,n}\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ c_{m-1,n-1} \\ c_{m-1,n} \\ c_{m-1,n+1} \\ \vdots \\ c_{m,n-1} \\ c_{m,n} \\ c_{m,n+1} \\ \vdots \\ c_{m+1,n-1} \\ c_{m+1,n} \\ c_{m+1,n+1} \\ \vdots \end{pmatrix}.$$
 (5.66)

On obtient la dynamique (5.65),

$$i\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} = \left(\hat{H}_{0} + e^{i\varphi_{12}}\hat{H}_{12}^{+} + e^{-i\varphi_{12}}\hat{H}_{12}^{-} + e^{i\varphi_{23}}\hat{H}_{23}^{+} + e^{-i\varphi_{23}}\hat{H}_{23}^{-} + e^{i\varphi_{31}}\hat{H}_{31}^{+} + e^{-i\varphi_{31}}\hat{H}_{31}^{-}\right)\left|\psi(t)\right\rangle,$$
(5.67)

avec,

$$\hat{H}_0 = \sum_{m,n\in\mathbb{Z}} \left(m^2 + n^2 - mn \right) \left| \phi_{m,n} \right\rangle \! \left\langle \phi_{m,n} \right|,$$

Conclusion

$$\begin{split} \hat{H}_{12}^{+} &= -\frac{s}{4} \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} |\phi_{m,n}\rangle \langle \phi_{m,n+1}| \,, \\ \hat{H}_{12}^{-} &= -\frac{s}{4} \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} |\phi_{m,n}\rangle \langle \phi_{m,n-1}| \,, \\ \hat{H}_{23}^{+} &= -\frac{s}{4} \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} |\phi_{m,n}\rangle \langle \phi_{m-1,n-1}| \,, \\ \hat{H}_{23}^{-} &= -\frac{s}{4} \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} |\phi_{m,n}\rangle \langle \phi_{m+1,n+1}| \,, \\ \hat{H}_{31}^{+} &= -\frac{s}{4} \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} |\phi_{m,n}\rangle \langle \phi_{m+1,n}| \,, \end{split}$$

 et

$$\hat{H}_{31}^{-} = -\frac{s}{4} \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} |\phi_{m,n}\rangle\!\langle\phi_{m-1,n}|.$$

Numériquement, nous considérons un espace de Hilbert de dimension finie, tel que $-M \leq m \leq M$ et $-N \leq n \leq N$. La dimension de cet espace est alors $d_{\mathcal{H}} = (2M+1) \times (2N+1)$. Nous considérons également la méthode suivante pour indexer les coefficients, $c_{m,n} = d_k$, où k = (m+M)(2n+N) + n + N avec $0 \leq k \leq N-1$ et $0 \leq k \leq N-1$.

L'application de GRAPE est alors similaire aux exemples donnés dans la section 3.1.1. Pour chacun des contrôles φ_{12} , φ_{23} et φ_{31} , la condition du maximum donnée par le PMP est,

$$\Im\left(\langle\chi(t)|\imath\left(\hat{H}_{l}^{+}-\hat{H}_{l}^{-}\right)|\psi(t)\rangle\right)=0,$$
(5.68)

où $|\chi\rangle$ est l'état adjoint et *l* correspond à l'indice 12, 23 ou 31.

5.4.4 Exemple

Nous considérons l'exemple du transfert du système de l'état initial $|\psi(0)\rangle = |0,0\rangle$ à un état final $|\psi_t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3,3\rangle + |-3,-3\rangle)$ en un temps $t_f = 250 \ \mu s$. La valeur des autres paramètres est la même qu'au chapitre 3.1.1.

La figure 5.8 illustre le résultat de l'optimisation numérique pour un tel transfert. Nous remarquons que les contrôles ne sont pas indépendants puisque les contrôles φ_{12} et φ_{31} sont égaux. Il est ainsi possible de se demander si cette remarque est vraie pour tout transfert ou non. La question de la contrôlabilité reste elle-même à étudier : peut-on atteindre n'importe quel état cible ou existe-t-il des états inatteignables?

Notons que nous avons considéré ici un réseau triangulaire, mais d'autres structures peuvent être envisagées.

5.5 Conclusion

Les quatre études présentées dans ce chapitre s'inscrivent dans la continuité de l'article [61]. Elles ont pour but d'améliorer la compréhension et les capacités de l'expérience afin d'en faire un démonstrateur opérationnel de simulation et de calcul quantique.

Cependant ces études ne sont qu'un premier pas vers une compréhension et manipulation complète du système. Afin d'approfondir cette étude, il serait intéressant de poursuivre ces travaux dans les directions suivantes :



(a) Contrôles φ_{12} , φ_{23} et φ_{31} en fonction du temps.

(b) Population, de l'état initial en orange, et de l'état final en bleu.

FIGURE 5.8 – Transfert de l'état $|\phi_{0,0}\rangle$ à l'état $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_{-3,-3}\rangle + |\phi_{3,3}\rangle)$.

- Les contrôles numériques trouvés par GRAPE ont été implémentés avec succès expérimentalement et ont permis de stabiliser stroboscopiquement le système sur un état de Floquet. Ce travail pourrait également être élargi pour inclure la stabilisation simultanée de plusieurs états de Floquet, ou d'un sous-espace de Floquet avec une quasi-énergie dégénérée. Avec cette approche, la recherche d'un Hamiltonien effectif [76] peut être transformée en un problème de transfert d'état à état. Ceci pourrait permettre de généraliser les résultats de l'article [62] sur le transport « ratchet ».
- Le contrôle de porte fait partie intégrante de la construction d'un calculateur quantique. Les résultats présentés dans ce chapitre permettent d'établir le formalisme du contrôle optimal dans ce cadre. Les premiers résultats numériques montrent qu'il est possible de réaliser des portes de n dimensions et sont encourageants pour envisager leur implémentation expérimentale; les premiers tests expérimentaux sont en cours actuellement. Cependant, la mesure expérimentale ne permet d'obtenir qu'une information sur la population dans les ordres d'impulsions pour un état initial. Ainsi, pour savoir si la porte a effectivement été générée expérimentalement, il reste à déterminer une méthode efficace impliquant plusieurs mesures pour différents états initiaux, pour caractériser complètement l'opérateur unitaire.
- La prise en compte des interactions entre les atomes du condensat permet une modélisation plus complète du système. Les résultats de ce chapitre montrent comment étendre l'algorithme GRAPE pour leur prise en compte. L'exemple présenté illustre l'importance de tenir compte de ces interactions pour certains transferts. La non-linéarité permettrait également de réduire le temps de contrôle. Il serait par conséquent intéressant de pouvoir la contrôler.
- Le contrôle du condensat dans un réseau 2D est une étape cruciale en vue de l'obtention d'un simulateur quantique. Les résultats de ce chapitre présentent une manière de modéliser un tel système et l'extension de GRAPE à ce problème. Les résultats numériques montrent qu'il est possible de réaliser des transferts d'état à état dans de telles conditions. Il est possible de réaliser une étude similaire pour un réseau 3D.

Interférométrie atomique

Résumé : Un interféromètre est un dispositif permettant d'estimer la valeur d'un paramètre en fonction des franges d'interférence obtenues à partir d'une onde que l'on sépare puis recombine. Dans le cas d'un interféromètre atomique, les interférences sont créées à partir d'ondes de matière. Pour l'expérience du LCAR, les ondes de matière sont celles d'un condensat de Bose-Einstein. Plus l'aire spatio-temporelle entre les deux bras de l'interféromètre est grande, meilleure est la précision sur l'estimation du paramètre. Il est donc naturel de vouloir séparer le plus possible en impulsion les deux bras. Dans le dispositif expérimental en question, l'un des bras est stabilisé sur l'état d'impulsion nul, et l'autre bras est accéléré puis décéléré. Cette configuration est dite de Mach-Zehnder. Pour obtenir des franges d'interférences, il est nécessaire de minimiser les pertes d'atomes du paquet d'onde à chaque transfert d'impulsion. Nous présentons dans ce chapitre une méthode novatrice pour accélérer en impulsion l'un des deux bras en utilisant une méthode basée sur la théorie de Floquet et le contrôle optimal, le tout en minimisant les pertes d'atomes. Une succession de contrôles permet d'atteindre des états d'impulsion de plus en plus grands de manière séquentielle. Le chapitre est divisé en deux sections.

Une première section présente les états de Floquet associés aux contrôles d'accélération en amplitude. Ces derniers ne sont pas optimaux dans le sens où ils ne sont pas obtenus par un algorithme d'optimisation. Ils sont choisis car ils sont simples à générer expérimentalement, robustes par rapport à la vitesse initiale du paquet d'onde et permettent un transfert en impulsion très rapide.

Une deuxième section présente l'utilisation du contrôle optimal pour transférer les atomes d'un des paquets d'onde sur l'état de Floquet visé à partir d'une variation de GRAPE pour obtenir des contrôles robustes, ainsi que les résultats pour transférer le système sur l'état de Floquet souhaité. Des résultats numériques et expérimentaux illustrent le transfert d'impulsion optimal.

6.1	Avant-propos	98
	Référentiel accéléré	99
6.2	Théorie de Floquet	99
	6.2.1 Description des états de Floquet	99
	6.2.2 Caractérisation des états de Floquet 1	01
6.3	Protocole de contrôle optimal robuste	05
6.4	Présentation des résultats	08

	6.4.1	Transfert par ingénierie de Floquet	108
	6.4.2	Lien avec le transfert adiabatique	112
6.5	Conclu	sion	112

6.1 Avant-propos

L'objectif de ce chapitre est de déterminer l'amplitude $\gamma(t)$ et la fréquence $\omega(t)$ du réseau optique pour accélérer le paquet d'onde. Il s'agit ainsi d'amener le système de l'état initial $|\psi\rangle = |0 + p_0\rangle$ à l'état $|2n + p_0\rangle$, où |n| doit être le plus grand possible et ce quelque soit $p_0 \in [-0.3, 0.3]$, puisque tous les atomes du paquet d'onde n'ont pas la même impulsion initiale (voir Eq. (3.31)). Typiquement, pour la réalisation de capteurs quantiques permettant la détection d'ondes gravitationnelles ou de matière noire, les transferts recherchés sont de l'ordre de n = 500 [1].

Notons que les autres étapes de l'interféromètre utilisent des contrôles classiques de type π et $\pi/2$ [12], en considérant typiquement une approximation à deux niveaux comme pour le système BEC présenté à la section 3.1.1.

Une première stratégie consiste à appliquer directement la théorie du contrôle optimal à ce problème de contrôle [94, 97]. Nous observons numériquement que cette méthode présente de fortes limites dues au très grand nombre d'états quantiques à considérer et à la large gamme de robustesse en p_0 requise expérimentalement.

Une deuxième méthode consiste à séquencer le transfert : le même contrôle est utilisé n fois de suite pour accélérer le système. Il a été montré que l'application successive d'impulsions π permet de transférer le système sur des états de l'ordre n = 100 [12, 35, 122, 131]. Cependant, à chaque impulsion, un nombre non négligeable d'atomes n'est pas accéléré. Il en résulte une grande perte d'atomes sur l'ensemble de la séquence, ce qui a pour conséquence une dégradation de la précision de la mesure par interférométrie atomique.

Une troisième méthode consiste à transférer adiabatiquement le système [45]. La fréquence $\omega(t)$ du réseau joue alors le rôle de quasi-moment défilant à vitesse constante. Le système reste en permanence dans l'état fondamental instantané et est transféré sur des ordres d'impulsions de plus en plus grands. Ce mécanisme est nommé oscillation de Bloch [36, 112, 117]. Bien que permettant des transferts également de l'ordre n = 100, ce type de transfert nécessite soit un temps de contrôle très long, soit une très grande profondeur de réseau. Dans les deux cas, cela représente une limitation expérimentale puisque le temps de l'expérience est limité au temps de chute libre du condensat et la puissance laser créant la profondeur du réseau est bornée. Notons que l'application du contrôle optimal permet de faire un transfert adiabatique rapide pour n = 20 [75].

L'idée de ce chapitre est de combiner une méthode de contrôle optimal avec une méthode de succession de contrôles discrets. Nous verrons que nous retrouvons des solutions similaires à celles des oscillations de Bloch pour des contrôles continus. Cela est rendu possible en considérant un repère en accélération permettant d'utiliser la théorie de Floquet. Une première impulsion de contrôle, en amplitude et en phase permet d'atteindre un état de Floquet spécifique. Une succession d'impulsions stabilise stroboscopiquement le système sur l'état de Floquet dans un référentiel accéléré. Finalement, une dernière impulsion de contrôle permet de transférer le système sur l'état cible. La figure 6.1 résume le processus. Les sections suivantes sont dédiées à la définition du référentiel accéléré et au choix de l'état de Floquet.



FIGURE 6.1 – À partir de l'état initial $|0 + p_0\rangle$, le système est transféré par un contrôle OC1 sur un état de Floquet. Dans le référentiel accéléré, le système est ensuite stabilisé par une succession d'impulsions « simples » et « rapides » qui permettent de stabiliser de manière stroboscopique le système. Un contrôle OC2 transfère le système sur l'état cible; ici $|-2N_f + p_0\rangle$.

Référentiel accéléré

Afin d'appliquer le formalisme de Floquet au transfert séquentiel en impulsion, la dynamique du système doit être périodique. Pour cela, nous effectuons une transformation supplémentaire pour passer du référentiel en chute libre (3.29) au référentiel accéléré. Celuici est lié à l'accélération du paquet d'onde par rapport au référentiel en chute libre. Ce dernier est défini à partir de la transformation unitaire $\hat{U}_3 = \exp[2i\kappa(t)\hat{z}]$ où $\kappa(t)$ est un paramètre dépendant du temps, choisi tel que $\frac{\omega}{2} + \kappa$ est τ - périodique. L'état $|\psi_3\rangle$ et l'Hamiltonien \hat{H}_3 peuvent être exprimés respectivement par $|\psi_3\rangle = U_3|\psi_2\rangle$ et $\hat{H}_3 = \hat{U}_3\hat{H}_2\hat{U}_3^{\dagger} + i\hat{U}_3\hat{U}_3^{\dagger}$. On en déduit que

$$i\frac{d|\psi_3(t)\rangle}{dt} = \hat{H}_3|\psi_3(t)\rangle$$

$$= \left[\left(\frac{\hat{p} - \omega(t)}{2} - \kappa(t)\right)^2 - 2\gamma(t)\cos(2\hat{z}) + 2\dot{\kappa}(t)\hat{z}\right]|\psi_3(t)\rangle.$$
(6.1)

Sauf indication contraire, toutes les quantités utilisées dans les sections suivantes sont sans dimension.

6.2 Théorie de Floquet

6.2.1 Description des états de Floquet

Dans le cadre de la chute libre, le but du processus d'accélération est de transférer l'état dans la base d'onde plane de $|p_0\rangle$ à $|-2n+p_0\rangle$ (où $n \ge 0$ peut être un très grand entier positif) le plus rapidement possible. Ce protocole de contrôle doit être robuste vis-à-vis de la distribution d'impulsion initiale des atomes, p_0 , dans le sens où les mêmes contrôles sont utilisés pour amener les atomes de l'état initial à l'état cible quelle que soit la valeur du paramètre p_0 . Comme introduit en avant-propos, nous proposons de réaliser ce type de transfert non par optimisation direct d'un contrôle mais par une méthode basée sur le formalisme de Floquet. La théorie de Floquet est détaillée dans la section 5.1 et stipule qu'amener le système sur un état de Floquet permet de le stabiliser stroboscopiquement.

Dans notre cas, il n'est pas pertinent d'utiliser cette approche dans le référentiel en chute libre puisque l'Hamiltonien correspondant n'est pas périodique, mais plutôt dans un référentiel accéléré où l'état du système serait stabilisé sur (ou proche de) $|0 + p_0\rangle$ et qui correspondrait à l'état $|-2n + p_0\rangle$ du référentiel en chute libre.

A ce stade, nous sommes confrontés à deux difficultés. La première est que l'état $|0+p_0\rangle$ n'est en général pas un état de Floquet du système et la seconde est que ce dernier dépend de p_0 . Nous définissons $|w_0(p_0)\rangle$ l'état de Floquet associé à une fonction générique γ ayant la plus grande projection sur l'état $|p_0\rangle$ et localisé dans l'espace des phases à la fois en position et en impulsion. Comme cet état dépend de p_0 , une famille continue d'états de Floquet $\{|w_0(p_0)\rangle\}$ pour une plage donnée de valeurs de p_0 est obtenue.

Nous décrivons maintenant plus en détail les états de Floquet. Nous considérons l'Hamiltonien périodique en temps \hat{H}_3 introduit dans l'équation (6.1) avec une fonction donnée $\gamma(t)$ définie sur l'intervalle $[0, \tau]$. En pratique, on utilise deux contrôles différents, à savoir un contrôle carré et un contrôle tanh [101] tels que

Impulsion carré :
$$\gamma(t) = \gamma_0$$
,
Impulsion tanh : $\gamma(t) = \gamma_0 \left(\tanh\left(\frac{8t}{\tau}\right) \tanh\left(8(1-\frac{t}{\tau})\right) \right)$,

pour $t \in [0, \tau]$. Le paramètre γ_0 est l'amplitude maximale de l'impulsion. Dans le référentiel accéléré, les états de Floquet sont définis comme les vecteurs propres de l'opérateur d'évolution \hat{U}_a de l'équation (6.1), $\hat{U}_a(\tau, 0)|w_n\rangle = e^{-i\epsilon_n\tau}|w_n\rangle$. D'un point de vue numérique, nous soulignons que les calculs ne sont pas effectués dans le référentiel accéléré, mais dans le référentiel en chute libre. Les états de Floquet sont des solutions de l'équation suivante

$$e^{2\iota\kappa(\tau)\hat{z}}\hat{U}_{\rm ff}(\tau,0) = e^{2\iota\hat{z}}\hat{U}_{\rm ff}(\tau,0)|w_n\rangle = e^{-\iota\epsilon_n\tau}|w_n\rangle,\tag{6.2}$$

où $\hat{U}_{\rm ff}$ est l'opérateur d'évolution associé à l'Hamiltonien \hat{H}_2 . Nous considérons ci-dessous le cas d'une impulsion carrée, mais des résultats très similaires sont obtenus pour celui en tanh.

Compte tenu de leur utilisation dans le processus d'accélération, nous recherchons des états localisés en position et en impulsion et proches de l'état $|0+p_0\rangle$ pour chaque valeur de p_0 . Les simulations numériques montrent que de telles conditions sont satisfaites pour une famille spécifique d'états notée $|w_0(p_0)\rangle$. L'aire du contrôle en amplitude est de π . Cette condition conduit à l'amplitude maximale $\gamma_0 = \pi/(2\tau)$ pour un contrôle carré avec la définition du temps τ sans dimension. Notons qu'il est possible de considérer une aire supérieure pour appliquer la méthode. Nous avons considéré celle qui semble être le meilleur compromis entre perte d'atomes et rapidité de l'expérience.

Un autre aspect clé de l'état est sa dépendance à l'égard de l'impulsion initiale p_0 des atomes. En effet, idéalement l'état $|w_0(p_0)\rangle$ trouvé devrait très peu dépendre de p_0 ce qui garantit la robustesse de la méthode. L'état de Floquet est calculé numériquement pour différentes valeurs de p_0 . Nous montrons dans la section 6.3 que moins cet état varie en fonction de p_0 , plus le processus de contrôle est efficace. Les figures 6.2, 6.3 et 6.4 présentent les populations de l'état de Floquet $|w_0(p_0)\rangle$ en fonction de p_0 pour différentes durées de contrôle τ . On observe que les états dépendent moins de p_0 pour des durées plus petites. Cela peut s'expliquer par le poids relatif des énergies cinétique et potentielle dans l'Hamiltonien \hat{H}_2 . Ce poids est lié à l'amplitude γ_0 , qui augmente à mesure que τ diminue. Notons également la symétrie de la population pour les valeurs positives et négatives de p_0 avec $|c_{+n}(p_0)|^2 = |c_{-n}(-p_0)|^2$. On a $|\omega_0(p_0)\rangle = \sum_n c_n(p_0) |n\rangle$.



FIGURE 6.2 – Populations $|c_n|^2$ de l'état de Floquet $|w_0(p_0)\rangle$ pour un contrôle γ_0 d'aire π de durée $\tau = 1 \ \mu s$ et différentes valeurs de p_0 (a) $p_0 = +0.6$, (b) $p_0 = +0.3$, (c) $p_0 = +0.1$, (d) $p_0 = -0.6$, (e) $p_0 = -0.3$, (f) $p_0 = -0.1$. Les lignes continues et pointillées correspondent respectivement aux valeurs positives et négatives de p_0 .

Des informations supplémentaires sur les phases de l'état $|w_0\rangle$ sont données dans la figure 6.3. Une évolution non triviale de celles-ci par rapport à n et p_0 est visible sur cette figure; une évolution qui ne satisfait pas la symétrie observée pour les populations.

Un dernier point concerne la dépendance à p_0 vis-à-vis de la quasi-énergie ϵ_0 . Dans le cas $\tau = 5.3 \ \mu$ s, les simulations numériques montrent que ϵ_0 est quasi constant, sa variation étant de l'ordre de 10^{-3} radians pour $p_0 \in [-0.9, 0.9]$. Cette phase supplémentaire ne sera pas prise en compte par la suite.

6.2.2 Caractérisation des états de Floquet

Dans cette section, nous étudions les états de Floquet dans l'espace des phases et nous montrons qu'ils peuvent être décrits comme des états Gaussiens squeezés.

Comme vu dans la section 3.1.1, nous pouvons définir des états gaussiens squeezés $|g(z, p, \xi)\rangle$ pour une position donnée (z, p) dans l'espace des phases. Ces états correspondent à des états gaussiens déformés par le paramètre de squeezing ξ le long de la position et/ou de l'impulsion [8, 60]. En utilisant les écarts $\Delta \hat{z}|_g$, $\Delta \hat{p}|_g$ et $\Delta \hat{z}|_s$, $\Delta \hat{p}|_s$ pour les états gaussiens et squeezés respectivement, le paramètre ξ satisfait $\xi = (\Delta \hat{z}|_s /\Delta \hat{z}|_g) = (\Delta \hat{p}|_s /\Delta \hat{p}|_g)^{-1}$.

L'état squeezé peut être exprimé dans la base propre de \hat{p} comme suit

$$c_n(z, p, \xi) \simeq e^{i\frac{zp}{2}} \left(\frac{\xi^2}{4\pi\sqrt{\gamma}}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{\xi^2(2n-p)^2}{8\sqrt{\gamma}} - 2inz\right].$$
 (6.3)



FIGURE 6.3 – Figure identique à la figure 6.2 mais pour $\tau = 5.3 \ \mu s$. Les phases $\arg(c_n)$ sont représentées en couleurs claires.



FIGURE 6.4 – Figure identique à la figure 6.2 mais pour $\tau = 30 \ \mu s$.

Un préfacteur positif est ajouté à la définition de c_n pour garantir que l'état est normalisé à un, $\sum_{n \in \mathbb{Z}} |c_n|^2 = 1$. Il est alors possible d'utiliser une représentation de Husimi pour représenter l'état quantique dans l'espace des phases.

Afin de caractériser l'état de Floquet $|w_0\rangle$, nous traçons sa représentation de Husimi dans l'espace des phases ainsi que celle d'un état squeezé. Un exemple est donné sur la figure 6.5pour une durée $\tau = 5.3 \ \mu s$ où nous montrons que l'état de Floquet correspondant est très similaire à un état squeezé déplacé à la fois en position et en impulsion avec un paramètre de squeezing $\xi = 1,07$. Nous utilisons un algorithme de Newton pour trouver les valeurs optimales de z et ξ . Le déplacement en impulsion est directement donné par la valeur de p_0 du système sous la forme $p = -p_0$. Nous soulignons que cette similarité est non seulement très bonne pour la représentation de Husimi, mais également en terme de populations et de phases dans la base propre de \hat{p} . Cette remarque est intéressante dans le sens où l'équation (6.3) conduit à une formule analytique des coefficients de l'état de Floquet. La figure 6.6 présente les résultats de la procédure d'identification pour différentes durées de contrôle τ . De très bons résultats sont obtenus pour des durées τ inférieures à 10 μ s. Nous avons vérifié que les états squeezés sont dans ce cas une approximation suffisante pour remplacer les états de Floquet dans le processus d'accélération. Cette conclusion n'est pas vraie pour des durées plus longues. Ce résultat est clairement montré sur la figure 6.7 où nous observons la différence entre l'état de Floquet et l'état squeezé le plus similaire.

Une propriété clé des états Gaussiens est que la dynamique dans l'espace des phases des valeurs moyennes des opérateurs $\langle \hat{z} \rangle$ et $\langle \hat{p} \rangle$ est bien reproduite par la trajectoire classique correspondante et que le paquet d'ondes n'est que peu modifié par la propagation. Nous étudions numériquement ces aspects dans le cas de l'état squeezé correspondant à l'état de Floquet pour $\tau = 5.3 \ \mu s$.

À partir de l'Hamiltonien classique,

$$H = \frac{(p + p_0 - \omega)^2}{4} - 2\gamma \cos(2z), \tag{6.4}$$

où p_0 et ω sont constants, $\omega = -2n - 1$, les équations de Hamilton peuvent être exprimées sous la forme

$$\dot{z} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p + p_0 - \omega}{2},$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial z} = -4\gamma \sin(2z).$$
(6.5)

L'état initial est défini par $(z(0), p(0) = -p_0)$. Une comparaison entre la trajectoire classique et l'évolution temporelle du centre du paquet d'ondes dans l'espace des phases est donnée sur la figure 6.8. Nous remarquons que l'accord entre les deux dynamiques est très bon. Le transfert en impulsion est bien décrit par les deux dynamiques, ici de 0 à -6. Le même calcul peut être effectué avec une approximation harmonique de l'énergie potentielle. L'Hamiltonien devient

$$H = \frac{(p+p_0-\omega)^2}{4} + 4\gamma z^2.$$
 (6.6)

La solution peut être explicitement écrite pour p(0) = 0 comme

$$z(t) = z(0)\cos(2\sqrt{\gamma}t) + \frac{1}{4\sqrt{\gamma}}\sin(2\sqrt{\gamma}t), \qquad (6.7)$$

$$p(t) = -1 - 4\sqrt{\gamma}z(0)\sin(2\sqrt{\gamma}t) + \cos(2\sqrt{\gamma}t).$$
(6.8)



FIGURE 6.5 – Représentation de Husimi dans l'espace des phases du réseau optique pour l'état de Floquet avec $p_0 = 0$ (a) et $p_0 = 0.9$ (c) et l'état squeezé correspondant (b) et (d) avec $\xi = 1.07$. Les populations et les phases des deux états pour $p_0 = 0$ sont représentées sur (e) et (f) (bleu pour l'état Floquet et orange pour l'état squeezé). L'état de Floquet est celui défini pour une impulsion carrée de durée $\tau = 5.3 \ \mu s$.



FIGURE 6.6 – (a) Maximum de $J = |\langle g(z, 0, \xi) | w_0 \rangle|^2$ en fonction de la durée d'impulsion τ pour $p_0 = 0$. (b) Paramètres optimaux ξ (ligne rouge) et z (ligne noire).

La condition $p(\tau) = -2$ conduit à

$$z(0) = \frac{1 + \cos(2\sqrt{\gamma}\tau)}{4\sqrt{\gamma}\sin(2\sqrt{\gamma}\tau)},\tag{6.9}$$

qui donne une bonne approximation de la position initiale $\langle \hat{z} \rangle(0)$ de l'état squeezé. Dans l'exemple de la figure 6.8, nous obtenons $z(0) \simeq 0, 12$ alors que la valeur calculée à partir de l'état quantique est de 0, 15.

Une interprétation physique peut être donnée en terme de forces. Nous utilisons ici le système non-adimensionné. L'idée est d'interpréter le déplacement en position de l'état quantique comme un équilibre entre la force d'inertie $-Ma_l$ dans le référentiel accéléré et la force de rappel due au réseau optique. Pour un contrôle de durée τ , la force d'inertie est donnée par $2\hbar k/\tau$, tandis que la force de rappel peut être exprimée comme $M\omega_{\rm osc}^2 \delta z$, où $\omega_{\rm osc}$ est la fréquence de l'oscillateur harmonique et δz le déplacement en position. On peut montrer que $\omega_{\rm osc} = 8\omega_r\sqrt{\gamma}$. Pour une impulsion π , l'amplitude maximale γ est fixée par la condition $8\omega_r\gamma\tau = \pi$. A l'équilibre, en égalisant les deux forces, on en déduit que

$$\delta z = \frac{2\hbar k}{\tau} \frac{1}{M\omega_{\rm osc}^2} = \frac{1}{2\pi k} \tag{6.10}$$

ce qui mène en coordonnées sans dimension à $k\delta z = \frac{1}{2\pi} \simeq 0, 16$ (voir figure 6.8).

6.3 Protocole de contrôle optimal robuste

Dans cette section, nous montrons comment atteindre de manière robuste l'état de Floquet $|w_0(p_0)\rangle$ à partir de l'état $|0 + p_0\rangle$. Pour cela nous considérons une version robuste de GRAPE [94, 99]. De manière identique, une version robuste de l'algorithme KROTOV peut être développée [73, 74].



FIGURE 6.7 – Figure identique à la figure 6.5 mais pour une durée $\tau = 15 \ \mu s.$ (a) et (b) correspondent aux représentations de Husimi pour $p_0 = 0$. Les paramètres de l'état squeezé sont z = 0,094 et $\xi = 1,19$. Les populations et phases correspondantes sont représentées dans (c) et (d).



FIGURE 6.8 – Représentation de Husimi avec l'état squeezé correspondant à l'état de Floquet pour une impulsion carrée de durée $\tau = 5.3 \ \mu s$, $\gamma = 3.12$. Les lignes rouges continues et noires pointillées représentent respectivement la trajectoire de la valeur moyenne des opérateurs $(\langle \hat{z} \rangle(t), \langle \hat{p} \rangle(t))$ et de la trajectoire classique (z, p) solution des équations de Hamilton lors de l'application de trois impulsions carrées.

La version robuste de GRAPE permet de calculer itérativement un contrôle qui quelque soit la valeur de p_0 comprise dans un intervalle permet de transférer le système de $|0 + p_0\rangle$ à $|w_0(p_0)\rangle$. Par rapport à l'algorithme GRAPE standard présenté dans la section 2.3.2, la propagation en avant et en arrière de l'état et de l'état adjoint se fait pour une succession de valeurs de p_0 dans l'intervalle considéré. Numériquement cela revient à rajouter une boucle sur p_0 à chaque nouvelle itération et calculer pour chaque valeur de p_0 une correction $\delta_{p_0} u$ (par exemple à l'aide du PMP). Le contrôle est alors mis à jour par la moyenne des corrections,

$$\delta u = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{p_0} u f(p_0) dp_0$$

où $f(p_0)$ est la distribution Gaussienne en p_0 du paquet d'onde (3.31). Le but est de maximiser les fidélités robustes,

$$\mathcal{F}_{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 - |\langle \psi(\tau_{c}) | w_{0}(p_{0}) \rangle|^{2} \right) f(p_{0}) dp_{0}$$
(6.11)

ou

$$\mathcal{F}_{2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 - \Re[\langle \psi(\tau_{c}) | w_{0}(p_{0}) \rangle]\right) f(p_{0}) dp_{0}.$$
(6.12)

Le coût \mathcal{F}_2 permet d'atteindre l'état à la fois en population et en phase tandis que le coût \mathcal{F}_1 à une phase globale près. Nous donnons une description de l'algorithme dans le pseudocode (3), pour une fidélité robuste quelconque \mathcal{F} .

Dans cet algorithme, il n'est pas possible de résoudre le problème pour $p_0 \in \mathbb{R}$. Ainsi, ce paramètre est discrétisé sur un intervalle I et est utilisé pour approximer la solution du contrôle.
Algorithme 3 : GRAPE robuste

Paramètres d'entrée : u_n^0 , p_0 , $\hat{H}(u_n)$, $|\psi_0\rangle$, $|\psi_t(p_0)\rangle$, C^0 , ϵ , α , t_n , dt, $k \leftarrow 0$; tant que $|\mathcal{F}^{k-1} - \mathcal{F}^k| \ge \alpha$ faire pour $p_0 \in I$ faire 1. Propager l'état $|\psi(t_n)\rangle$ depuis l'état initial $|\psi_0\rangle$, avec $\hat{U}_n = e^{-i\hat{H}(u_n)dt}$, $|\psi(t_n)\rangle = \hat{U}_{n-1} \dots \hat{U}_0 |\psi_0\rangle$ 2. Propager l'état adjoint $\langle \chi(t_n)|$ depuis la condition finale $\langle \chi(t_N)|$, $\langle \chi(t_n)| = \langle \chi(t_N)| \hat{U}_{N-1} \dots \hat{U}_n$ 3. Calculer la correction $\delta_{p_0} u^k$: Calculer la correction moyenne δu^k et la fidélité \mathcal{F}^k associée $k \leftarrow k+1$; Sortie : u_n

Notons qu'une version séquentielle de l'algorithme permet également d'obtenir un contrôle robuste. Le contrôle n'est pas mis à jour par la moyenne des corrections δu mais par chaque correction $\delta_{p_0}u$. Le détail de l'algorithme est présenté dans [54]. Dans le cadre de cette expérience, nous calculons les contrôles optimaux en phase $\omega(t)$ et en amplitude $\gamma(t)$. L'application du PMP donne les conditions du maximum suivantes,

$$\frac{\partial H_p}{\partial \omega} = 0 \Rightarrow \Im\left(\left\langle \chi(t) | 2\left(\frac{\hat{p}}{2} - \frac{\omega(t)}{2}\right) | \psi(t) \right\rangle\right) = 0$$
(6.13)

$$\frac{\partial H_p}{\partial \gamma} = 0 \Rightarrow \Im\left(\langle \chi(t) | -2\cos\left(2z\right) | \psi(t) \rangle\right) = 0 \tag{6.14}$$

Ces deux conditions sont utilisées pour mettre à jour à chaque itération les deux paramètres de contrôles.

6.4 Présentation des résultats

6.4.1 Transfert par ingénierie de Floquet

Dans cette section nous présentons les résultats numériques de la séquence d'accélération complète : transfert de $|0 + p_0\rangle$ à l'état de Floquet $|w_0(p_0)\rangle$, puis stabilisation stroboscopique sur cet état dans le référentiel accéléré.

On note τ_c le temps de contrôle qui permet d'amener le système de $|0 + p_0\rangle$ à l'état de Floquet $|w_0(p_0)\rangle$. Ce temps est fixé à 100 μ s dans les simulations numériques. Pour les états de Floquet utilisés dans cette étude, ce temps conduit à une bonne convergence de l'algorithme GRAPE. Nous appliquons l'algorithme GRAPE robuste présenté ci-dessus à ce transfert. Notons que la dynamique est propagée à partir de l'équation de Schrödinger (3.29) dans le référentiel en chute libre pour une valeur donnée du paramètre p_0 . Comme introduit à la section 2.2.3, la fidélité \mathcal{F}_2 prend en compte la phase de $|w_0(p_0)\rangle$, ce qui n'est pas le cas de \mathcal{F}_1 .

L'algorithme optimise à la fois l'amplitude $\gamma(t)$ et la fréquence $\omega(t)$ du réseau optique. Afin de guider le processus d'optimisation, notons que $\omega(t)$ est exprimé comme $\omega(t) = \omega_0 +$ $\omega_c(t)$ où ω_0 est une constante qui est fixée à -1/2, et seul ω_c est optimisé. L'amplitude est contrainte telle que $0 \le \gamma(t) \le 6$, ce qui correspond à la puissance laser maximale disponible expérimentalement.

Dans les optimisations numériques, le paramètre continu p_0 est remplacé par un ensemble fini d'éléments avec $p_0 \in \{-0.9, -0.6, -0.3, -0.1, 0, 0.1, 0.3, 0.6, 0.9\}$. Ce choix est suffisant pour avoir une bonne approximation de 99% des atomes dans une classe d'impulsion initiale avec $\sigma_p = 0.3$.

La figure 6.9 montre la comparaison de l'état au temps τ_c sur l'état de Floquet $|w_0(p_0)\rangle$, en terme de population $|\langle \psi | \Psi_0 \rangle|^2$ et de phase arg $(\langle \psi | \Psi_0 \rangle)$, obtenue pour différentes optimisations. On considère une optimisation avec \mathcal{F}_1 pour $\sigma_p = 0.1$, et $\sigma_p = 0.3$ ainsi qu'une optimisation avec \mathcal{F}_2 pour $\sigma_p = 0.3$. Numériquement, nous constatons une très bonne convergence de l'algorithme pour les différents cas. Nous remarquons que même en utilisant la fidélité \mathcal{F}_1 , la phase de l'état final $|\psi(\tau_c)\rangle$ ne varie que légèrement en fonction de p_0 . La même procédure



FIGURE 6.9 – Transfert optimal de $|0\rangle$ vers $|w_0\rangle$ en fonction de p_0 . (a) et (b) représentent respectivement le module carré et l'argument du produit scalaire $\langle \psi(\tau_c)|w_0(p_0)\rangle$. L'état de Floquet est défini pour un contrôle carré d'une durée $\tau = 5.3 \ \mu s$. Les stratégies de contrôle optimales avec \mathcal{F}_1 pour $\sigma_p = 0, 1, \mathcal{F}_1$ pour $\sigma_p = 0, 3$ et F_2 pour $\sigma_p = 0, 3$ sont respectivement tracées en ligne pointillée verte, ligne pointillée orange. et ligne bleue continue.

peut être utilisée pour effectuer le transfert inverse de $|w_0(p_0)\rangle$ vers $|p_0\rangle$ ou de $|w_0(p_0)\rangle$ vers $|2n + p_0\rangle$ en ajustant le terme constant ω_0 de manière à respecter une condition de résonance vers la transition considérée.

Les solutions de contrôle optimal sont ensuite combinées avec une série de contrôles tanh ou carrées afin d'accélérer le paquet d'onde. Les processus de contrôle correspondant de $|0\rangle$ à $|-15\rangle$ sont représentés sur les figures 6.10 et 6.11.

Jusqu'à présent, nous avons considéré une fonction constante par morceaux $\omega(t) = -2n - 1$, $\tau \in [n\tau, (n+1)\tau[$. Cependant, la méthode peut être généralisée à une rampe linéaire de la fréquence du réseau telle que,

$$\omega(t) = -\frac{2t}{\tau}, \ t \in [n\tau, (n+1)\tau[.$$
(6.15)



FIGURE 6.10 – Processus d'accélération d'une durée totale t_f de l'état $|0\rangle$ à $|-30\rangle$, n = -15. (a), (b), (c) et (d) représentent respectivement l'amplitude γ , la fréquence ω , les populations $|c_n|^2$ et la fidélité $|\langle \psi(\tau_c) | w_0 \rangle|^2$ en fonction de p_0 . Dans (a) et (b), les parties verte et bleue représentent respectivement le transfert de $|0\rangle$ vers $|w_0\rangle$ et le transfert inverse dans le repère accéléré. L'état de Floquet $|w_0\rangle$ est défini à partir d'un contrôle tanh (avec $\tau = 8 \ \mu s$ et $\gamma = 2.5$) en rouge. Dans (c), l'état initial et l'état final sont représentés respectivement en jaune et en bleu. Les états de Floquet initial et intermédiaire sont représentés en vert et rouge. La flèche rouge indique la direction du processus d'accélération. Le système est soumis à une série de 15 impulsions tanh. La durée totale du processus est de $t_f = 2 \times 100 + 15 \times 8 = 320 \ \mu s$.



FIGURE 6.11 – Figure identique à la figure 6.10 mais pour une série de 15 impulsions carrées de durée $\tau = 5.3 \ \mu s$. La durée totale du processus est $t_f = 2 \times 100 + 15 \times 5.3 = 279.5 \ \mu s$.



FIGURE 6.12 – Figure identique à la figure 6.11 mais pour une rampe linéaire en ω pendant le processus d'accélération.

De la même manière, il est possible de calculer les états de Floquet associés à partir des états propres de l'opérateur unitaire $e^{2i\hat{z}}\hat{U}_{\rm ff}(\tau,0)$. Le processus d'accélération dans ce cas est représenté sur la figure 6.12. On observe la même efficacité que dans le cas discret où ω est une fonction constante par morceaux.

6.4.2 Lien avec le transfert adiabatique

D'autres méthodes que le contrôle optimal sont utilisées pour séparer les bras d'un interféromètre atomique en impulsion. L'une d'elle est le contrôle adiabatique [64]. Brièvement, cette méthode consiste à garder le système dans l'état fondamental du réseau $|\Psi_0(t)\rangle$ à tout instant [149]. La variation lente des paramètres de contrôle permet le transfert du système sur des ordres d'impulsions plus élevés. Les avantages de cette méthode sont la simplicité des contrôles mis en jeu, ce qui est particulièrement intéressant dans le contexte expérimental, ainsi que la robustesse de ceux-ci [110]. Cependant, les contrôles adiabatiques nécessitent une très grande aire de contrôle. Ainsi afin de réaliser un transfert adiabatique, il est nécessaire de choisir un temps de contrôle assez long et/ou une grande puissance laser.

Il est intéressant de noter que la méthode que nous proposons permet de retrouver un transfert adiabatique. En effet, le choix d'une rampe linéaire (6.15) pour la phase et d'un contrôle carré en amplitude d'une aire assez grande (nous choisissons numériquement $\gamma_0 = 100$ et $\tau = 5.3 \ \mu s$), correspond à un transfert adiabatique. La figure 6.13 montre la projection $|\langle \psi | \Psi_0 \rangle|^2$ de l'état du système, propagé depuis l'état de Floquet $|w_0 \rangle$), sur l'état fondamental du réseau. Nous remarquons bien qu'à chaque instant les deux états correspondent. Ce qui n'est pas le cas pour une impulsion d'aire π , soit $\gamma_0 = 3.12$.

Dans cette analyse, nous remarquons que l'état correspond à chaque instant à l'état fondamental instantané de l'Hamiltonien du système. Physiquement, dans ce cas, le paquet d'onde est confiné au fond du puits de potentiel du réseau optique; l'accélération lente du puits par les paramètres de contrôle amène à l'accélération du système. Contrairement au cas présenté précédemment, le déplacement en position est ici nul z = 0 (6.9). La méthode basée sur les états de Floquet permet en quelque sorte d'accélérer le transfert adiabatique et peut être considérée comme un « shortcut to adiabaticity » [53, 81, 142, 143, 153].

6.5 Conclusion

Les résultats présentés ci-dessus ont été implémentés expérimentalement avec succès [130]. La figure 6.14 montre la population de l'état du système dans le référentiel $(|2n + p_0\rangle)_{n \in \mathbb{Z}}$ du référentiel accéléré, pour un transfert de $|\psi(0)\rangle = |0 + p_0\rangle$ à $|\psi(t_f) = |-2N_f + p_0\rangle\rangle$ de la base en chute libre. Cette méthode a permis d'atteindre un transfert record de n = 300. L'ensemble des résultats, théoriques et expérimentaux, ont conduit à la rédaction d'un article soumis à Nature Communication.

Plusieurs points et défis subsistent en vue d'améliorer la performance et la compréhension du dispositif expérimental :

— Le choix et la caractérisation de l'état de Floquet peut faire l'étude d'une recherche approfondie. Les premiers tests numériques montrent qu'il est possible, pour des impulsions d'aire supérieure à π , de considérer d'autres états de Floquet que $|w_0\rangle$. Dans la limite adiabatique introduite plus haut, il semble que ces états correspondent aux états de Bloch de l'Hamiltonien du système à une phase globale près.



FIGURE 6.13 – $|\langle \psi | \Psi_0 \rangle|^2$ en fonction du temps. En orange pour un état est propagé à partir de l'état de Floquet $|w_0\rangle$ pour une impulsion carrée $\gamma_0 = 100$, et une rampe linéaire en phase. En bleu pour $\gamma_0 = 3.12$. $|\Psi_0\rangle$ correspond à l'état fondamental instantané.

- Un autre point crucial pour améliorer le transfert est l'étude de la robustesse par rapport à l'amplitude γ . En effet, la puissance du laser n'est pas exactement connue et est soumise à des variations. Il serait judicieux de les considérer dans les simulations numériques. A l'instar de la robustesse en p_0 , il est possible de définir un état de Floquet qui dépend de γ . Il est nécessaire qu'il soit localisé en position et impulsion et qu'il ne varie pas beaucoup selon les valeurs de γ considérées. Idéalement, le contrôle doit être robuste par rapport à ces deux paramètres. Il est possible de calculer numériquement un contrôle robuste pour les deux paramètres en définissant un état de Floquet $w_k(p_0, \gamma)$ sur une grille de valeurs de p_0 et γ .
- Le contrôle optimal n'a pour l'instant été utilisé que dans la phase d'accélération. Dans un deuxième temps, il pourra également être appliqué aux impulsions π et $\pi/2$ afin de limiter les pertes d'atomes durant ces étapes.



FIGURE 6.14 – Image de fluorescence expérimentale montrant la population du système dans les différents ordres d'impulsions du référentiel accéléré durant un transfert de $|\psi(0)\rangle =$ $|0 + p_0\rangle$ à $|\psi(t_f) = |-2N_f + p_0\rangle\rangle$ [130]. L'application d'une première impulsion de contrôle optimal permet d'atteindre l'état de Floquet $|w_0\rangle$ depuis $|\psi(0)\rangle$, qui est ensuite stabilisé stroboscopiquement dans le référentiel accéléré. Finalement une dernière impulsion de contrôle permet de transférer le système sur l'état $|\psi(t_f)\rangle$.

Estimation d'un paramètre

Résumé : Ce chapitre est consacré à l'utilisation du contrôle optimal pour estimer la valeur d'un paramètre. En effet, il est fréquent dans un dispositif expérimental, que la valeur d'un paramètre du modèle soit mal connue. La mesure est effectuée à l'aide d'un système quantique. On parle alors de métrologie quantique, qui permet d'améliorer la précision de la mesure par rapport à un système classique [52, 70, 71, 120].

Dans ce contexte, il est possible d'utiliser le contrôle optimal pour résoudre un tel problème [84, 108, 156]. Au lieu de transférer le système d'un état initial à un état cible, comme nous l'avons fait jusqu'à présent, l'objectif du contrôle est de maximiser la distance entre deux états finaux pour deux valeurs proches du paramètre à estimer. Ainsi, en fonction de l'état final obtenu, il est alors possible de discriminer la valeur du paramètre, et de l'estimer.

La notion d'information de Fisher permet d'appréhender le concept d'estimation de paramètre. Dans le cadre de la mécanique quantique, on distinguera l'information de Fisher classique (CFI) [25] et l'information de Fisher quantique (QFI) [3, 84, 85]. Il est possible de montrer que maximiser l'information de Fisher, classique ou quantique, permet d'augmenter la précision de la mesure du paramètre.

La première section du chapitre est dédiée à la description de ces notions. Une deuxième section est consacrée à la généralisation de GRAPE dans le cadre de la maximisation de l'information de Fisher classique et quantique. Une troisième section est consacrée à l'application des résultats pour l'estimation d'une force magnétique dans le cas de l'expérience BEC.

7.1	Concepts				
	7.1.1	Distance de Fubini	6		
	7.1.2	Information de Fisher quantique	7		
		Expression de la QFI	.7		
		Une autre expression de la QFI	.8		
		Borne de la QFI 11	.9		
	7.1.3	PVM/POVM	!1		
		Information de Fisher classique 12	22		
		Coïncidences entre QFI et CFI 12	22		
7.2	Application du contrôle optimal				
	7.2.1	Contrôle de l'information de Fisher quantique	23		

		Maximisation de la QFI	123
		Fingerprinting	124
	7.2.2	Contrôle de l'information de Fisher classique	125
		Maximisation de la CFI	125
		Fingerprinting avec pondération	126
7.3	Estim	ation d'une force magnétique	126
	7.3.1	Maximisation de la QFI : cas d'un système BEC borné	127
	7.3.2	Maximisation de la QFI : cas d'un système BEC de dimension infinie	128
	7.3.3	Fingerprinting avec pondération	130
	7.3.4	Simulation d'un processus d'estimation	130
7.4	Concl	usion	132

7.1 Concepts

D'un point de vue expérimental, la valeur des paramètres n'est pas toujours exactement connue. Il est ainsi primordial de disposer de méthodes afin de les estimer et garantir la précision du modèle utilisé. Pour une expérience de RMN, il peut s'agir d'estimer l'offset ou l'amplitude du champ magnétique. Pour l'expérience BEC, les paramètres clés sont le quasi-moment ou bien la profondeur du réseau.

Le but de ce chapitre est de présenter les concepts liés à l'estimation de paramètre et de les appliquer aux systèmes quantiques. En statistique la notion d'information de Fisher permet de quantifier le degré d'information que l'on a sur un paramètre du système ; paramètre dont la valeur n'est a priori pas connue. La maximiser revient à réduire l'incertitude sur la valeur de ce paramètre. Cette notion peut être étendue aux systèmes quantiques.

7.1.1 Distance de Fubini

Supposons la dynamique d'un système quantique évoluant dans un espace de Hilbert \mathcal{H} selon un Hamiltonien qui dépend d'un paramètre inconnu X. L'évolution de l'état $|\psi\rangle$ dépend ainsi également de X. On peut par conséquent définir une distance, à un temps t_f non nul, entre deux états $|\psi_{X_1}(t_f)\rangle$ et $|\psi_{X_2}(t_f)\rangle$; pour une même condition initiale $|\psi_0\rangle$. Cette distance est nommée distance de Fubiny-Study et est définie par [26],

$$d^{2}\left(\left|\psi_{X_{1}}\right\rangle,\left|\psi_{X_{2}}\right\rangle\right) = \arccos^{2}\left(\sqrt{\left\langle\psi_{X_{2}}\left|\psi_{X_{1}}\right\rangle\left\langle\psi_{X_{1}}\right|\psi_{X_{2}}\right\rangle}\right).$$
(7.1)

Pour deux valeurs X_1 et X_2 extrêmement proches et en l'absence de contrôle sur la dynamique, les états associés $|\psi_{X_1}(t_f)\rangle$ et $|\psi_{X_2}(t_f)\rangle$ seront très proches si bien que nous pouvons écrire,

$$\sqrt{\langle \psi_{X_2} | \psi_{X_1} \rangle \langle \psi_{X_1} | \psi_{X_2} \rangle} \simeq 1.$$
(7.2)

Ainsi, au premier ordre, l'équation (7.1) peut se mettre sous la forme,

$$d^{2}(|\psi_{X_{1}}\rangle,|\psi_{X_{2}}\rangle) = 1 - |\langle\psi_{X_{1}}|\psi_{X_{2}}\rangle|^{2}.$$
(7.3)

On retrouve alors l'expression de la fidélité F_1 (2.38) pour les états $|\psi_{X_1}(t_f)\rangle$ et $|\psi_{X_2}(t_f)\rangle$. Cependant, dans ce cas, le but sera de la maximiser [10, 147]. En effet, intuitivement, si les deux états, associés chacun à une valeur de X sont différents, il devient possible d'estimer le paramètre X par l'étude du résultat de l'expérience. Posons $|\psi_{X_1}\rangle = |\psi_{X_0}\rangle$ et $|\psi_{X_2}\rangle = |\psi_{X_0+dX}\rangle$, où dX est une petite variation autour de $X = X_0$, une estimation préalable du paramètre inconnu. L'état associé peut s'écrire, au premier ordre, comme suit :

$$|\psi_{X_0+dX}\rangle = |\psi_{X_0}\rangle + \frac{\partial |\psi_{X_0}\rangle}{\partial X} dX.$$
(7.4)

En injectant (7.4) dans (7.3), on trouve une expression de la fidélité (7.3) qui dépend de la dérivée de l'état par rapport à X,

$$F = 1 - \left| \left\langle \psi_{X_0 + dX} | \psi_{X_0} \right\rangle \right|^2$$

= $1 - \left| \left\langle \psi_{X_0} + \frac{\partial \psi_{X_0}}{\partial X} dX | \psi_{X_0} \right\rangle \right|^2$
= $1 - \left(1 + dX \left\langle \psi_{X_0} | \partial_X \psi_{X_0} \right\rangle + dX \left\langle \partial_X \psi_{X_0} | \psi_{X_0} \right\rangle + dX^2 \left| \left\langle \partial_X \psi_{X_0} | \psi_{X_0} \right\rangle \right|^2 \right).$ (7.5)

En remarquant que $\langle \psi_{X_0+dX} | \psi_{X_0+dX} \rangle = 1$, on peut en déduire la propriété suivante :

$$dX \langle \psi_{X_0} | \partial_X \psi_{X_0} \rangle + dX \langle \partial_X \psi_{X_0} | \psi_{X_0} \rangle = -dX^2 \langle \partial_X \psi_{X_0} | \partial_X \psi_{X_0} \rangle.$$
(7.6)

Il en découle que,

$$F = dX^2 \left\langle \partial_X \psi_{X_0} | \partial_X \psi_{X_0} \right\rangle - dX^2 \left| \left\langle \partial_X \psi_{X_0} | \psi_{X_0} \right\rangle \right|^2.$$
(7.7)

Enfin, au facteur dX^2 près, la fidélité à maximiser pour déterminer la valeur de X est,

$$F = \left\langle \partial_X \psi_{X_0} | \partial_X \psi_{X_0} \right\rangle - \left| \left\langle \partial_X \psi_{X_0} | \psi_{X_0} \right\rangle \right|^2, \tag{7.8}$$

ce qui représente exactement un quart de l'information de Fisher Quantique (QFI), comme nous le verrons ci-dessous. Nous noterons maintenant $|\psi_{X_0}\rangle$ par $|\psi\rangle$ et $\partial_X |\psi_{X_0}\rangle$ par $\partial_X |\psi\rangle$.

7.1.2 Information de Fisher quantique

Expression de la QFI

Nous allons maintenant dériver deux autres expressions pour la QFI, que l'on note \mathcal{F}_Q . Elles seront utiles dans le cadre de sa maximisation.

Commençons par écrire la dynamique des états $|\psi\rangle$ et $\partial_X |\psi\rangle$,

$$i\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}|\psi\rangle\\|\partial_X\psi\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\hat{H} & 0\\\partial_X\hat{H} & \hat{H}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}|\psi\rangle\\|\partial_X\psi\rangle\end{pmatrix}$$
(7.9)

avec les conditions initiales $|\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle$, et $|\partial_X \psi\rangle = 0$. La dynamique de $\partial_X |\psi\rangle$ est obtenue en dérivant l'équation de Schödinger par X. La solution d'un tel système est donnée par,

$$\begin{pmatrix} |\psi(t)\rangle\\ |\partial_X\psi(t)\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{U}(t) & 0\\ \partial_X\hat{U}(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_0\rangle\\ 0 \end{pmatrix}$$
(7.10)

avec,

$$\hat{U}(t) = \hat{I} - \imath \int_{0}^{t} \hat{H}(\tau) \hat{U}(\tau) d\tau$$
(7.11)

 et

$$\partial_X \hat{U}(t) = -i \hat{U}(t) \int_0^t \hat{U}^{\dagger}(\tau) \partial_X \hat{H}(\tau) \hat{U}(\tau) d\tau.$$
(7.12)

On peut alors re-écrire la QFI telle que,

$$QFI = 4 \left(\left\langle \partial_X \psi | \partial_X \psi \right\rangle - \left| \left\langle \psi | \partial_X \psi \right\rangle \right|^2 \right)$$
(7.13)

$$= 4 \left(\left. \langle \psi_0 | \frac{\partial \hat{U}^{\dagger}}{\partial X} \frac{\partial \hat{U}}{\partial X} | \psi_0 \rangle - \left| \left. \langle \psi_0 | \hat{U}^{\dagger} \frac{\partial \hat{U}}{\partial X} | \psi_0 \rangle \right|^2 \right).$$
(7.14)

Soit $\hat{A} = \int_0^t \hat{U}^{\dagger}(\tau) \partial_X \hat{H}(\tau) \hat{U}(\tau) d\tau$, nous obtenons,

$$\mathcal{F}_Q = 4\left(\left. \langle \psi_0 | \hat{A}^2 | \psi_0 \rangle - \left| \left. \langle \psi_0 | \hat{A} | \psi_0 \rangle \right|^2 \right).$$
(7.15)

Finalement la QFI est égale à quatre fois la variance de l'opérateur \hat{A} ,

$$\mathcal{F}_{Q} = 4 \left(\left\langle \hat{A}^{2} \right\rangle_{|\psi_{0}\rangle} - \left\langle \hat{A} \right\rangle_{|\psi_{0}\rangle}^{2} \right)$$

= 4 Var $\left[\hat{A} \right]_{|\psi_{0}\rangle}$, (7.16)

qui dépend de la condition initiale $|\psi_0\rangle$.

Il est possible d'exprimer la relation (7.16) en fonction de l'état $|\psi(t)\rangle$ à un instant t en utilisant la relation $|\psi_0\rangle = \hat{U}^{\dagger}(t) |\psi(t)\rangle$. Nous obtenons,

$$\mathcal{F}_Q = 4 \operatorname{Var} \left[\hat{A}' \right]_{|\psi(t)\rangle} \tag{7.17}$$

avec $\hat{A}' = \hat{U}(t) \int_0^t \hat{U}^{\dagger}(\tau) \partial_X \hat{H}(\tau) \hat{U}(\tau) d\tau \hat{U}^{\dagger}(t).$

Une autre expression de la QFI

Nous dérivons dans cette section une troisième expression de la QFI après (7.13) et (7.15). Ces calculs sont dérivés d'une communication interne de Quentin Ansel et en partie présentés dans [6].

D'après (7.15), nous avons,

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \int_0^t \left\langle \psi(\tau_1) \right| \frac{\partial \hat{H}(\tau_1)}{\partial X} |\psi(\tau_1)\rangle \, d\tau_1 \tag{7.18}$$

et,

$$\left\langle \hat{A}^2 \right\rangle = \int_0^t \int_0^t \left\langle \psi(\tau_1) \right| \frac{\partial \hat{H}(\tau_1)}{\partial X} \hat{U}(\tau_1) \hat{U}^{\dagger}(\tau_2) \frac{\partial \hat{H}(\tau_2)}{\partial X} \left| \psi(\tau_2) \right\rangle d\tau_2 d\tau_1.$$
(7.19)

En introduisant $\{|\Phi_k\rangle \in \mathcal{H}, k = 1, ..., \dim(\mathcal{H}) - 1\}$ une base de vecteurs du complémentaire orthogonal à $|\psi_0\rangle$, et la relation de fermeture,

$$|\psi_0\rangle\!\langle\psi_0| + \sum_{k=1}^{\dim(\mathcal{H})-1} |\Phi_k\rangle\!\langle\Phi_k| = \hat{I}, \qquad (7.20)$$

on obtient,

$$\hat{U}(\tau_1)\hat{I}\hat{U}(\tau_2) = |\psi(\tau_1)\rangle\!\langle\psi(\tau_2)| + \sum_{k=1}^{\dim(\mathcal{H})-1} |\Phi_k(\tau_1)\rangle\!\langle\Phi_k(\tau_2)|.$$
(7.21)

Concepts

Puis on arrive à,

$$\left\langle \hat{A}^2 \right\rangle = \int_0^t \int_0^t \left\langle \psi(\tau_1) \right| \frac{\partial \hat{H}(\tau_1)}{\partial X} |\psi(\tau_1)\rangle \left\langle \psi(\tau_2) \right| \frac{\partial \hat{H}(\tau_2)}{\partial X} |\psi(\tau_2)\rangle \, d\tau_2 d\tau_1 + \sum_{k=1}^{\dim(\mathcal{H})^{-1}} \int_0^t \int_0^t \left\langle \psi(\tau_1) \right| \frac{\partial \hat{H}(\tau_1)}{\partial X} |\Phi_k(\tau_1)\rangle \left\langle \Phi_k(\tau_2) \right| \frac{\partial \hat{H}(\tau_2)}{\partial X} |\psi(\tau_2)\rangle \, d\tau_2 d\tau_1.$$

$$(7.22)$$

Ce qui donne,

$$\left\langle \hat{A}^2 \right\rangle = \left(\int_0^t \left\langle \psi(\tau_1) | \frac{\partial \hat{H}(\tau_1)}{\partial X} | \psi(\tau_1) \right\rangle d\tau_1 \right)^2 + \sum_{k=1}^{\dim(\mathcal{H})-1} \left| \int_0^t \left\langle \psi(\tau_1) | \frac{\partial \hat{H}(\tau_1)}{\partial X} | \Phi_k(\tau_1) \right\rangle d\tau_1 \right|^2.$$
(7.23)

En insérant (7.23) et (7.18) dans (7.15), nous obtenons la troisième expression de la QFI,

$$\mathcal{F}_Q = 4 \sum_{k=1}^{\dim(\mathcal{H})-1} \left| \int_0^t \langle \psi(\tau) | \frac{\partial \hat{H}(\tau)}{\partial X} | \Phi_k(\tau) \rangle \, d\tau \right|^2.$$
(7.24)

Borne de la QFI

Montrons que la QFI est bornée pour tout $t \in \mathbb{R}_+$. Nous supposons que l'espace de Hilbert est de dimension finie N. Soit l'opérateur \hat{B} dont le spectre de valeur propre n'est pas dégénéré, et noté $E_1 < E_2 < \cdots < E_N$. Nous pouvons développer n'importe quel état $|\psi\rangle$ dans la base $\{|k\rangle\}$ des vecteurs propres de \hat{B}

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{N} c_n |k\rangle.$$
(7.25)

Posons $G = \sum_{k=1}^{N} |c_k|^2 - 1$. Les coefficients doivent satisfaire,

$$G = 0. \tag{7.26}$$

Le but est de maximiser la variance de \hat{B} donnée par,

$$V = \operatorname{Var} \left[\hat{B} \right]_{|\psi\rangle}$$

= $\left\langle \hat{B}^2 \right\rangle_{|\psi\rangle} - \left\langle \hat{B} \right\rangle_{|\psi\rangle}^2$
= $\sum_{k=1}^N |c_k|^2 E_k^2 - \left(\sum_{k=1}^N |c_k|^2 E_k \right)^2$. (7.27)

Posons $S = \sum_{k=1}^{N} |c_k|^2 E_k$. Nous pouvons écrire le problème de maximisation comme,

$$\max_{\substack{c_1,\dots,c_N \in \mathbb{C}\\G=0}} V. \tag{7.28}$$

L'application de la méthode des multiplicateurs de Lagrange donne la relation,

$$\nabla V = \lambda \nabla G \tag{7.29}$$

où $\lambda \in \mathbb{R}$ est le multiplicateur de Lagrange, et ∇ le gradient par rapport aux coefficients c_k . Nous obtenons,

$$\sum_{k=1}^{N} \left((c_k^* + c_k) (E_k^2 - 2E_k - \lambda S) \right) = 0.$$
(7.30)

La solution est donnée soit par $c_k = 0$ pour k = 1, ..., N, ce qui n'est pas possible car elle ne respecte pas la contrainte ou par $E_k = S \pm \sqrt{S^2 - \lambda}$. Cela implique qu'au moins deux coefficients c_k sont différents de zéro, c_q et c_p . La solution est alors $S = \frac{E_p + E_q}{2}$. Nous obtenons le système suivant,

$$\begin{cases} |c_q|^2 E_q + |c_p|^2 E_p = \frac{E_p + E_q}{2} \\ |c_q|^2 + |c_p|^2 = 1 \end{cases}$$
(7.31)

ce qui donne la solution $|c_q|^2 = |c_p|^2 = \frac{1}{2}$. Donc à une phase globale, nous avons $c_p = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\vartheta}$ et $c_q = \frac{1}{\sqrt{2}}$. La variance de \hat{B} est alors,

$$V = |c_q|^2 E_q^2 + |c_p|^2 E_p^2 - (|c_q|^2 E_q + |c_p|^2 E_p)^2$$

= $\frac{1}{4} (E_q - E_p)^2.$ (7.32)

Ainsi, le maximum de la variance de \hat{B} est $\frac{1}{4}(E_N - E_1)^2$, obtenu pour l'état

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|N\rangle + e^{i\vartheta} |1\rangle \right), \qquad (7.33)$$

où ϑ est une phase relative.

Appliquons ce résultat à l'opérateur \hat{A} (7.16). La différence des valeurs propres de \hat{A} s'obtient simplement puisqu'elle est l'intégrale d'un opérateur de la forme $\hat{U}^{\dagger}\partial_{X}\hat{H}\hat{U}$. Les opérateurs d'évolution ne nous donnent qu'un changement de base, et il suffit donc de considérer la différence de valeurs propres de $\partial_{X}\hat{H}$. En les notant μ_{max} et μ_{min} , on obtient finalement :

$$\mathcal{F}_Q \le \left(\int_0^t \left(\mu_{max}(\tau) - \mu_{min}(\tau)\right) d\tau\right)^2.$$
(7.34)

La QFI est donc bornée par le carré de l'intégrale de la différence des valeurs propres maximum et minimum de \hat{A} .

Pour un Hamiltonien indépendant du temps de la forme $\hat{H} = X\hat{H}_0$ où \hat{H}_0 est un Hamiltonien de référence, il est possible de choisir un état spécifique qui sature la borne à chaque instant. Dans ce cadre, nous avons $\hat{U}(t) = e^{i\hat{H}t}$. Ainsi, l'opérateur \hat{A}' peut se simplifier tel que,

$$\hat{A}' = \hat{U}(t) \int_0^t \hat{U}^{\dagger}(\tau) \hat{H}_0 \hat{U}(\tau) d\tau \hat{U}^{\dagger}(t) = t \hat{H}_0.$$
(7.35)

En utilisant l'expression de la QFI (7.17) et les résultats ci-dessus, nous obtenons,

$$\mathcal{F}_{Q} = 4 \operatorname{Var} \left[t \hat{H}_{0} \right]_{|\psi(t)\rangle}$$

= $4 t^{2} \operatorname{Var} \left[\hat{H}_{0} \right]_{|\psi(t)\rangle}$
 $\leq t^{2} \left(\mu_{max} - \mu_{min} \right)^{2}.$ (7.36)

Ainsi, la borne est saturée pour $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_{max}\rangle + e^{i\vartheta} |\psi_{min}\rangle \right)$ avec $|\psi_{max}\rangle$ and $|\psi_{min}\rangle$ les états propres associées à la plus grande et la plus petite valeur propre de \hat{H}_0 .

7.1.3 PVM/POVM

Avant de présenter l'information de Fisher classique, nous introduisons les notions de PVM (Projection-Valued Measure) et de POVM (Positive Operator-Valued Measure).

Dans cette section, nous considérons un espace de Hilbert de dimension finie. L'état du système est décrit par la fonction d'onde $|\psi\rangle$.

POVM. Un POVM (Positive-Operator valued measure) est un ensemble d'opérateurs Hermitiens semi-définis positifs avec $k = 1, \dots, K$ tel que,

$$\sum_{k} \hat{E}_k = I \tag{7.37}$$

ou de manière équivalente,

$$\sum_{k} \langle \psi | \hat{E}_{k} | \psi \rangle = 1, \quad | \psi \rangle \in \mathcal{H}.$$
(7.38)

Notons que les éléments diagonaux de \hat{E}_k sont compris dans l'intervalle [0, 1] et s'interprètent comme des probabilités.

PVM. Un PVM (Projection-valued measure) est un POVM où les opérateurs \hat{E}_k sont de plus idempotents et orthogonaux deux à deux,

$$\begin{cases} \hat{E}_k^2 = \hat{E}_k, & k \in K\\ \hat{E}_k \hat{E}_{k'} = 0, & k \neq k'. \end{cases}$$

Une manière naturelle de définir un PVM est de considérer une base orthonormale $\{|j\rangle\}$ de \mathcal{H} , avec $\hat{E}_j = |j\rangle\langle j|$. Remarquons que $K = \dim(\mathcal{H})$. Par définition, chaque élément \hat{E}_k est un projecteur de rang 1. Le processus de mesure est défini comme suit. La probabilité d'obtenir le résultat k est $p_k = \langle \psi | \hat{E}_k | \psi \rangle$ et l'état après la mesure est

$$\left|\psi_{\text{post}}^{(k)}\right\rangle = \frac{E_k |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{E}_k|\psi\rangle}}.$$
(7.39)

Dans le cas d'un POVM, les opérateurs ne sont généralement pas des projecteurs, c'est-àdire $\hat{E}_k^2 \neq \hat{E}_k$ et leur rang peut être supérieur à un. La probabilité du résultat k est toujours $p_k = \langle \psi | \hat{E}_k | \psi \rangle$, mais l'état post-mesure ne peut pas être spécifié. Pour chaque opérateur \hat{E}_k , nous introduisons l'opérateur de Kraus \hat{M}_k tel que $\hat{E}_k = \hat{M}_k^{\dagger} \hat{M}_k$. Remarquons que de tels opérateurs de Kraus ne sont pas uniques et sont définis à une transformation unitaire conduisant au même opérateur \hat{E}_k . L'état après la mesure est

$$\left|\psi_{\text{post}}^{(k)}\right\rangle = \frac{\hat{M}_{k}\left|\psi\right\rangle}{\sqrt{\left\langle\psi\right|\hat{E}_{k}\left|\psi\right\rangle}}.$$
(7.40)

Information de Fisher classique

L'information de Fisher classique, que l'on note \mathcal{F}_C , s'écrit pour un système quantique dont l'évolution dépend du paramètre X à estimer, et par rapport à un PVM donné { $|\alpha_k\rangle\langle\alpha_k|$ },

$$\mathcal{F}_C = \sum_k \frac{1}{|\langle \alpha_k | \psi \rangle|^2} \left[\frac{d}{dX} |\langle \alpha_k | \psi \rangle|^2 \right]^2, \tag{7.41}$$

qui peut se simplifier par,

$$\mathcal{F}_C = \sum_k \frac{1}{|\langle \alpha_k | \psi \rangle|^2} \left[\langle \partial_X \psi | \alpha_k \rangle \langle \alpha_k | \psi \rangle + \langle \psi | \alpha_k \rangle \langle \alpha_k | \partial_X \psi \rangle \right]^2.$$
(7.42)

Par rapport à un POVM $\{\hat{E}_k\}$, la CFI devient,

$$\mathcal{F}_C = \sum_k \frac{1}{\langle \psi | \hat{E}_k | \psi \rangle} \left[\langle \partial_X \psi | \hat{E}_k | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{E}_k | \partial_X \psi \rangle \right]^2.$$
(7.43)

Plusieurs remarques peuvent être faites par rapport à ces résultats.

La QFI et la CFI sont liées. En effet, on peut définir la QFI comme étant le maximum de la CFI sur tous les POVM [25]. Autrement dit :

$$\mathcal{F}_Q = \max_{\{\hat{E}_k\}} \mathcal{F}_C. \tag{7.44}$$

Ceci signifie que la QFI représente la quantité maximale d'information sur le paramètre X que l'on peut extraire d'un état quantique donné en optimisant la mesure quantique.

Pour l'expérience BEC, le résultat de la mesure donne l'état dans les différents ordres d'impulsions. Ainsi le PVM est $\{|\phi_{q+n}\rangle\langle\phi_{q+n}|\}$.

Dans le contexte expérimental, il se peut que malgré la maximisation de la QFI, la CFI soit nulle pour un PVM donné. La précision sur la valeur du paramètre X à estimer n'est alors pas améliorée. Plusieurs stratégies sont possibles, soit changer de PVM, soit maximiser la CFI pour un PVM donné; les deux méthodes étant équivalentes après un changement de base [6].

Coïncidences entre QFI et CFI

Nous étudions dans cette section les conditions pour lesquelles la CFI et la QFI sont égales. Elles permettent de déterminer si le PVM utilisé expérimentalement est adéquat à l'estimation du paramètre X. Les calculs présentés reposent sur une communication interne avec Bruno Peaudecerf.

Dans le sous-espace $\{|\psi\rangle\}, \{|\partial_X\psi\rangle\}$, nous définissons l'état,

$$|\psi_{\perp}\rangle = \frac{1}{N} \left(|\partial_X \psi\rangle - \langle \psi | \partial_X \psi \rangle |\psi\rangle \right).$$
(7.45)

Puisque $\langle \psi | \partial_X \psi \rangle + \langle \partial_X \psi | \psi \rangle = 0$, cela implique que $\langle \psi | \partial_X \psi \rangle = ib$ avec $b \in \mathbb{R}$. Nous posons également,

$$\langle \partial_X \psi | \psi_\perp \rangle = \frac{1}{N} \left(\langle \partial_X \psi | \partial_X \psi \rangle - b^2 \right) = \frac{4\mathcal{F}_Q}{N} = c.$$
 (7.46)

Ainsi,

$$\left|\partial_X\psi\right\rangle = ib\left|\psi\right\rangle + c\left|\psi_{\perp}\right\rangle \tag{7.47}$$

et

$$\mathcal{F}_Q = 4c^2 \tag{7.48}$$

Pour la CFI, tout opérateur \hat{E}_k d'un POVM peut s'exprimer sous forme matricielle comme,

$$\hat{E}_k = \begin{pmatrix} p_k & \beta_k \\ \beta_k^* & p_k^\perp \end{pmatrix}, \tag{7.49}$$

avec $p_k, p_k^{\perp} \ge 0$ et $|\beta_k| \le \sqrt{p_k p_k^{\perp}}$. Puisque $\sum_k E_k = I$, nous obtenons,

	$\sum_k p_k$	=	1
ł	$\sum_k p_k^{\perp}$	=	1
	$\sum_k \beta_k$	=	0

Nous posons alors $\beta_k = |\beta_k| \exp[i\phi_k]$, et nous en déduisons que

$$\langle \psi | \hat{E}_k | \partial_X \psi \rangle = \imath b p_k + c \beta_k \tag{7.50}$$

 et

$$\mathcal{F}_{C} = 4c^{2} \sum_{k} \frac{|\beta_{k}|^{2}}{p_{k}} \cos^{2}(\phi_{k}).$$
(7.51)

La coïncidence entre QFI et CFI se produit lorsque $\beta_k^2 = p_k p_k^{\perp}$; $\beta_k \in \mathbb{R}$, $\phi_k = 0$ ou π , et nous avons,

$$CFI = 4c^2 \sum_{k} p_k^k = 4c^2$$
(7.52)

Notons que le POVM nécessite un nombre impaire d'opérateurs.

7.2 Application du contrôle optimal

Nous proposons dans cette section une extension de GRAPE afin de maximiser la QFI et la CFI.

7.2.1 Contrôle de l'information de Fisher quantique

Maximisation de la QFI

Le but est de maximiser la QFI à un temps t_f fixé. On définit le coût à maximiser,

$$\mathcal{C} = \mathcal{F}_Q = 4 \left(\langle \partial_X \psi | \partial_X \psi \rangle - |\langle \psi | \partial_X \psi \rangle|^2 \right).$$
(7.53)

Rappelons que les états $|\psi\rangle$ et $|\partial_X\psi\rangle$ évoluent dans le temps selon la relation (7.10),

$$i\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}|\psi\rangle\\|\partial_X\psi\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\hat{H} & 0\\\partial_X\hat{H} & \hat{H}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}|\psi\rangle\\|\partial_X\psi\rangle\end{pmatrix}.$$
(7.54)

L'Hamiltonien dépend d'un contrôle u(t). Dans ce cas, l'application du PMP donne un Hamiltonien de contrôle,

$$H_p = \Im \Big(\langle \chi | \hat{H}_X | \psi \rangle + \langle \partial_X \chi | \partial_X \hat{H} | \psi \rangle + \langle \partial_X \chi | \hat{H} | \partial_X \psi \rangle \Big)$$
(7.55)

avec $(|\chi\rangle, |\partial_X \chi\rangle)$ l'état adjoint. Sa dynamique est donnée par,

$$i\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} |\chi(t)\rangle\\ |\partial_X\chi(t)\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H} & \partial_X\hat{H}\\ 0 & \hat{H}_X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\chi(t)\rangle\\ |\partial_X\chi(t)\rangle \end{pmatrix}.$$
(7.56)

Finalement, puisque l'état $|\psi(t_f)\rangle$ au temps final est libre, la condition de transversalité sur l'état adjoint donne,

$$|\chi(t_f)\rangle = \chi_0 \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \langle \psi(t_f) |} = - \langle \partial_X \psi(t_f) | \psi(t_f) \rangle | \partial_X \psi(t_f) \rangle$$
(7.57)

$$\left|\partial_X \chi(t_f)\right\rangle = \chi_0 \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \left\langle \partial_X \psi(t_f) \right|} = -\left\langle \psi(t_f) \left| \partial_X \psi(t_f) \right\rangle \left| \psi(t_f) \right\rangle + \left| \partial_X \psi(t_f) \right\rangle, \tag{7.58}$$

avec $\chi_0 = +1$ car le coût est à maximiser. La condition du maximum est $\frac{\partial H_p}{\partial u}$. Le contrôle est alors trouvé itérativement. Dans le cas du système BEC, le contrôle est mis à jour à chaque itération par (3.18).

Deux problèmes se posent quant à l'utilisation de cette méthode.

Premièrement, il n'est pas évident de donner un critère d'arrêt de l'algorithme. En effet, pour le cas d'un transfert d'état à état, avec la fidélité F_1 ou F_2 , l'algorithme est stoppé lorsque la fidélité est inférieure à un seuil proche de zéro, ce qui garantit que le contrôle est optimal et permet le transfert. Pour la QFI, l'algorithme est stoppé lorsque le gradient de la fidélité est proche de zéro. Cependant, cela n'implique pas obligatoirement que le contrôle correspondant maximise la QFI. En effet, l'optimisation consiste à maximiser une fonction dont le maximum n'est pas connu. Ainsi, à part dans le cas où la QFI sature la borne, il n'est pas possible d'affirmer que le contrôle est le maximum global. Ceci rend l'utilisation de GRAPE dans ce cas difficile.

Deuxièmement, nous avons remarqué qu'il est difficile de faire converger numériquement l'algorithme dans le cas du système BEC, et plus généralement dans les systèmes de grandes dimensions.

Fingerprinting

Une autre manière d'appréhender le problème est de considérer le coût (7.3) à maximiser, soit,

$$\mathcal{C} = 1 - |\langle \psi_{X_0} | \psi_{X_0 + dX} \rangle|^2$$

avec X_0 une estimation à priori de la valeur du paramètre à estimer, et dX une variation autour de X. On parle alors d'une méthode de fingerprinting [7, 9, 37, 109]. Un tel coût permet de séparer deux états quantiques pour deux valeurs proches de X, et par conséquent discriminer la valeur de X. La QFI peut être calculée en propagent le système étendu (7.10).

L'algorithme GRAPE est modifié de la sorte. Reprenons le même principe. Soit deux valeurs du paramètre X_1 et X_2 , et les états associés $|\psi_{X_1}(t)\rangle$ et $|\psi_{X_2}(t)\rangle$. L'évolution temporelle de l'état est régie par l'équation de Schrödinger,

$$i\frac{d\left|\psi_{X_{k}}(t)\right\rangle}{dt} = \hat{H}(X_{k}, u(t))\left|\psi_{k}(t)\right\rangle,\tag{7.59}$$

avec $k \in [[1, 2]]$, et la condition initiale $|\psi_k(0)\rangle = |0\rangle$. L'Hamiltonien de contrôle est :

$$H_p = \Im \left(\langle \chi_{X_1} | \hat{H}(u(t)) | \psi_{X_1} \rangle + \langle \chi_{X_2} | \hat{H}(u(t)) | \psi_{X_2} \rangle \right)$$
(7.60)

avec $|\chi_{X_k}(t)\rangle$ l'état adjoint, dont la dynamique est,

$$i\frac{d\left|\chi_{X_{k}}(t)\right\rangle}{dt} = \hat{H}(u(t))\left|\chi_{X_{k}}(t)\right\rangle,\tag{7.61}$$

avec pour condition au temps final,

$$|\chi_{X_1}(t_f)\rangle = \chi_0 \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \langle \psi_{X_1}(t_f) |} = - \langle \psi_{X_2}(t_f) | \psi_{X_1}(t_f) \rangle | \psi_{X_2}(t_f) \rangle$$
(7.62)

$$|\chi_{X_2}(t_f)\rangle = \chi_0 \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial |\psi_{X_2}(t_f)\rangle} = -\langle \psi_{X_1}(t_f) |\psi_{X_2}(t_f)\rangle |\psi_{X_1}(t_f)\rangle.$$
(7.63)

Encore une fois, ici $\chi_0 = +1$, puisque le coût est à maximiser.

Contrairement au cas précédent, ici nous avons le critère d'arrêt est bien défini, lorsque le coût est proche de 1. Cependant, le résultat de l'optimisation dépend du paramètre dX. Et il doit être ajuster afin d'obtenir la meilleure QFI possible.

7.2.2 Contrôle de l'information de Fisher classique

Maximisation de la CFI

De la même manière que pour la QFI, il est possible de modifier GRAPE pour maximiser la CFI. La seule différence par rapport à la maximisation de la QFI (voir section 7.2.1) concerne le coût et la condition au temps final de l'état adjoint. La CFI (7.42) à l'instant t_f peut s'exprimer comme

$$F = \sum_{k} F_k \tag{7.64}$$

avec

$$F_{k} = \frac{1}{\langle \alpha_{k} | \psi \rangle \langle \psi | \alpha_{k} \rangle} \left[\langle \alpha_{k} | \partial_{X} \psi \rangle \langle \psi | \alpha_{k} \rangle + \langle \alpha_{k} | \psi \rangle \langle \partial_{X} \psi | \alpha_{k} \rangle \right]^{2}$$
(7.65)

оù

$$F_{k} = \frac{\langle \psi | \alpha_{k} \rangle}{\langle \alpha_{k} | \psi \rangle} \langle \alpha_{k} | \partial_{X} \psi \rangle^{2} + \frac{\langle \alpha_{k} | \psi \rangle}{\langle \psi | \alpha_{k} \rangle} \langle \partial_{X} \psi | \alpha_{k} \rangle^{2} + 2 \langle \alpha_{k} | \partial_{X} \psi \rangle \langle \partial_{X} \psi | \alpha_{k} \rangle .$$
(7.66)

Nous en déduisons que

$$\frac{\partial F_k}{\partial \langle \partial_X \psi |} = 2 \frac{\langle \alpha_k | \psi \rangle}{\langle \psi | \alpha_k \rangle} \langle \partial_X \psi | \alpha_k \rangle | \alpha_k \rangle + \langle \alpha_k | \partial_X \psi \rangle | \alpha_k \rangle$$
(7.67)

 et

$$\frac{\partial F_k}{\partial \langle \psi |} = \frac{\langle \alpha_k | \partial_X \psi \rangle^2}{\langle \alpha_k | \psi \rangle} |\alpha_k \rangle - \frac{\langle \alpha_k | \psi \rangle}{\langle \psi | \alpha_k \rangle^2} \langle \partial_X \psi | \alpha_k \rangle^2 |\alpha_k \rangle.$$
(7.68)

La correction pour le contrôle est calculée avec l'Hamiltonien de Pontryagin qui ne dépend pas du coût final.

L'utilisation de GRAPE pour l'optimisation de la CFI et de la QFI permet leur maximisation dans un système à deux niveaux [6]. Cependant comme évoqué dans la section 7.2.1, nous n'avons pas trouvé de résultat similaire pour le système BEC. Ces coûts ne semblent pas numériquement adaptés à ce système de plus grande dimension.

Fingerprinting avec pondération

La maximisation de la QFI n'implique pas forcément la maximisation de la CFI. En effet cela dépend du PVM expérimental choisi pour la mesure du système. Une approche, qui ne consiste pas à optimiser directement la CFI, consiste à utiliser le coût de la méthode du fingerprinting présenté à la section 7.2.1, et de rajouter un terme $g|\langle \alpha_k | \psi_{X_1} \rangle|^2$ à celui-ci. Le but de ce terme est d'amener l'état associé à la valeur X_1 sur un des états de la base du PVM, et ainsi discriminer la valeur de X. Ce coût est un compromis entre maximisation de la QFI et de la CFI.

La seule différence avec le fingerprinting (7.3) est le coût et la condition au temps final sur l'état adjoint. Dans ce cas elle devient,

$$|\chi_{X_1}(t_f)\rangle = g \langle \alpha_k | \psi_{x_1}(t_f) \rangle | \alpha_k \rangle - \langle \psi_{X_2}(t_f) | \psi_{X_1}(t_f) \rangle | \psi_{X_2}(t_f) \rangle.$$
(7.69)

Le choix du facteur de pondération g et de l'état $|\alpha_k\rangle$ de projection sont à ajuster de manière à maximiser la CFI.

7.3 Estimation d'une force magnétique

L'objectif est d'appliquer les résultats théoriques précédents au cas de l'estimation d'un paramètre de l'expérience BEC. Ce paramètre correspond à une force magnétique que l'on applique au système. Cette force est appliquée à l'aide d'une bobine parcourue par un courant électrique et générant une force d'environ 10^{-25} N. En unité adimensionné cela correspond à une force λ de l'ordre de 1×10^{-3} . Dans ce cas le modèle (3.4) s'écrit tel que,

$$i\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} = \left(\left(\hat{p} + \lambda t\right)^2 - \frac{s}{2}\cos\left(\hat{x} + \varphi(t)\right)\right)\left|\psi(t)\right\rangle,\tag{7.70}$$

et sous forme matricielle,

$$a\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} = \left(\hat{H}_{0}(t) + \cos\left(\varphi(t)\right)\hat{H}_{1} + \sin\left(\varphi(t)\right)\hat{H}_{2}\right)\left|\psi(t)\right\rangle,\tag{7.71}$$

avec

$$\hat{H}_{0}(t) = \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ \dots & 0 & ((n-1)+q+\lambda t)^{2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & (n+q+\lambda t)^{2} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & ((n+1)+q+\lambda t)^{2} & 0 & \dots \\ & & \ddots & & \ddots \end{pmatrix}.$$
(7.72)

Le ket $|\psi\rangle$ et les matrices \hat{H}_1 et \hat{H}_2 sont inchangés par rapport aux systèmes (3.7).

Le premier objectif que l'on se fixe est l'optimisation de la QFI. Nous considérerons plusieurs cas. Nous étudions dans un premier temps, la dynamique seulement dans le sousespace $\{|\phi_{q-1}\rangle, |\phi_{q+0}\rangle, |\phi_{q+1}\rangle\}$. Dans ce cas idéal, il est possible de montrer que stabiliser le système sur un état spécifique permet de maximiser la QFI; la borne est saturée et évolue en t^4 . Dans le cas plus réaliste du système dans l'espace de Hilbert total, il est possible de maximiser la QFI en procédant à un processus de montée en échelle. Celui-ci consiste à atteindre successivement l'état $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_{q+n}\rangle + |\phi_{q-n}\rangle)$, pour $n = 1, 2, \ldots$ La QFI évolue alors en t^6 . Ces mécanismes sont expliqués ci-dessous.

Le problème de ces contrôles est qu'il ne maximise que la QFI. La CFI reste nulle pour le PVM de mesure expérimentale. L'objectif est donc de maximiser la CFI. L'utilisation du fingerprinting avec pondération (section 7.2.2) permet alors d'augmenter la CFI.

7.3.1 Maximisation de la QFI : cas d'un système BEC borné

Considérons le problème dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$ correspondant au sous-espace,

$$\{ |\phi_{q-1}\rangle, |\phi_{q+0}\rangle, |\phi_{q+1}\rangle \}.$$

Dans ce cas, l'application de la formule (7.34), donne

$$\mathcal{F}_Q \le \left(\int_0^t \left(\mu_{max}(\tau) - \mu_{min}(\tau)\right) d\tau\right)^2.$$
(7.73)

En sachant que la dérivée de l'Hamiltonien (7.70) par λ est égale à $\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} = 2t (\hat{p} + \lambda t)$, on trouve que la QFI est bornée par,

$$\mathcal{F}_Q \le 4 \left| \int_0^t -2\tau d\tau \right| = 4t^4. \tag{7.74}$$

Nous pouvons montrer que le choix d'un état initial et d'un contrôle spécifique permet d'atteindre cette borne à tout instant. L'application de la relation (7.24) donne,

$$\mathcal{F}_{Q} = 4 \left[\sum_{i=1}^{2} \left| \int_{0}^{t} \langle \psi(\tau) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \Phi_{i}(\tau) \rangle d\tau \right|^{2} \right]$$
$$= 4 \left[\sum_{i=1}^{2} \left| \int_{0}^{t} \langle \psi(0) | \hat{U}^{\dagger} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \hat{U} | \Phi_{i}(0) \rangle d\tau \right|^{2} \right].$$
(7.75)

Si le contrôle en amplitude s(t) est fixé à s = 0, l'opérateur d'évolution \hat{U} et l'opérateur $\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}$ commute. On a alors,

$$\mathcal{F}_Q = 4 \left[\sum_{i=1}^2 \left| \int_0^t \langle \psi(0) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \Phi_i(0) \rangle \, d\tau \right|^2 \right].$$
(7.76)

Si de plus on choisit l'état initial $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_{q+1}\rangle + e^{i\vartheta} |\phi_{q-1}\rangle \right)$ avec ϑ une phase relative, nous avons par construction $|\Phi_1(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_{q+1}\rangle - e^{i\vartheta} |\phi_{q-1}\rangle \right)$ et $|\Psi_2\rangle(0) = |\phi_{q+0}\rangle$, et le calcul de la QFI donne,

$$\mathcal{F}_Q = 4 \left| \int_0^t -2\tau d\tau \right| = 4t^4. \tag{7.77}$$

Sous ces conditions, la QFI évolue donc en $4t^4$ (figure 7.1) et est maximale puisque égale à la borne.



FIGURE 7.1 – (a) Évolution de l'information de Fisher classique en orange et quantique en bleu pour un contrôle s(t) = 0. Le trait vert pointillé correspond à la borne de la QFI. (b) Évolution de la QFI et de la borne en t^4 .

Nous remarquons que ce calcul est applicable pour les sous-espaces,

$$\{ |\phi_{q-n}\rangle, \cdots, |\phi_{q+0}\rangle, \cdots, |\phi_{q+n}\rangle \}.$$

La QFI évolue alors en $4n^2t^4$ et il faut choisir l'état initial $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_{q+n}\rangle + e^{i\vartheta} |\phi_{q-n}\rangle \right)$. Finalement, dans le cas d'un espace de Hilbert fini de dimension $d_{\mathcal{H}} = 2n+1$ et pour l'état initial $|\psi(0)\rangle = |\phi_{q+0}\rangle$, la stratégie optimale consiste à calculer un contrôle pour atteindre l'état cible $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_{q+n}\rangle + e^{i\vartheta} |\phi_{q-n}\rangle \right)$, puis d'éteindre le réseau avec s = 0.

7.3.2Maximisation de la QFI : cas d'un système BEC de dimension infinie

Nous considérons maintenant l'espace de Hilbert de dimension infinie.

Pour un espace tronqué, l'état qui maximise la QFI est $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_{q+n}\rangle + e^{i\vartheta} |\phi_{q-n}\rangle \right).$ L'idée pour maximiser la QFI dans un espace de dimension infinie est d'atteindre cet état pour un *n* toujours plus grand. Pour un état initial $|\psi(0)\rangle = |\phi_{q+0}\rangle$, le système est transféré sur l'état $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_{q+1}\rangle + e^{i\vartheta} |\phi_{q-1}\rangle \right)$, puis l'état $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_{q+2}\rangle + e^{i\vartheta} |\phi_{q-2}\rangle \right)$ et ainsi de suite. Ce mécanisme se nomme montée en échelle et est illustré sur la figure 7.2.

En notant Δt le temps de chaque transfert, nous pouvons montrer que la QFI évolue telle que,

$$\mathcal{F}_Q \simeq \left(\sum_{k=0}^{n-1} \int_{k\Delta t}^{(k+1)\Delta t} 4k\tau d\tau\right)^2.$$
(7.78)



FIGURE 7.2 – Schéma illustrant le mécanisme de montée en échelle. A partir de l'état initial $|\psi(0)\rangle = |\phi_{q+0}\rangle$, l'objectif est d'atteindre l'état $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_{q+1}\rangle + e^{i\vartheta} |\phi_{q-1}\rangle\right)$, puis l'état $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_{q+2}\rangle + e^{i\vartheta} |\phi_{q-2}\rangle\right)$ et ainsi de suite.

Cela donne,

$$QFI \simeq \left(\sum_{k=0}^{n-1} (\Delta t)^2 (4k^2 + 2k)\right)^2$$
(7.79)

soit,

$$\mathcal{F}_Q \simeq (\Delta t)^4 \left(\frac{2}{3}n(n-1)(2n-1) + n(n+1)\right)^2.$$
 (7.80)

Pour $n \gg 1$, nous avons,

$$\mathcal{F}_Q \simeq \frac{16}{9} n^6 (\Delta t)^4.$$
 (7.81)

Sachant que $n = \frac{t}{\Delta t}$, nous obtenons,

$$\mathcal{F}_Q \simeq \frac{16}{9} \frac{t^6}{(\Delta t)^2}.\tag{7.82}$$

Et la QFI évolue bien en t^6 .

La figure 7.3 illustre l'évolution de la QFI pour le mécanisme de montée en échelle. Pour chaque transfert, GRAPE est utilisé pour calculer le contrôle optimal correspondant. Le paramètre lié à la force magnétique est $\lambda = 1 \times 10^{-3}$, la profondeur du réseau est s = 5, et le temps de chaque transfert est $\Delta t = 100 \mu s$.

Bien que la QFI soit maximisée, nous remarquons que la CFI quant à elle reste nulle. Cela signifie que dans le PVM de mesure, ce mécanisme ne suffit pas pour estimer le paramètre. Nous pouvons nous en convaincre par l'étude de la population à l'instant $t = n\Delta t$ avec n = 6. Nous remarquons que la population pour deux états associées à des valeurs proches de λ ($\lambda_1 = 1 \times 10^{-3}$ et $\lambda_2 = 1.5 \times 10^{-3}$) sont quasiment identiques; ces états diffèrent seulement par une phase relative.

Notons que l'utilisation de GRAPE dans le cas du fingerprinting (section 7.2.1) donne un résultat similaire. En effet, la solution trouvée par l'algorithme revient à un mécanisme de montée en échelle.



FIGURE 7.3 – (a) Évolution de l'information de Fisher classique en orange et quantique en bleu pour un contrôle de type montée en échelle. Le trait vert pointillé correspond à la borne de la QFI. (b) Population au temps final. En bleu pour $\lambda_1 = 1 \times 10^{-3}$ et en orange pour $\lambda_2 = 1.5 \times 10^{-3}$.

7.3.3 Fingerprinting avec pondération

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, la maximisation de la QFI ne permet pas de distinguer la différence de population. Pour cela, il faut augmenter la CFI.

Dans ce cas il est possible d'appliquer la version de GRAPE qui consiste à faire du Fingerprinting et un transfert d'état à état simultanément comme dans la section 7.2.2. Le but est d'utiliser un coût qui maximise la QFI et qui renvoie l'état associé à λ_1 sur un état $|\phi_{q+n}\rangle$. La figure 7.4 montre l'évolution de la QFI et de la CFI dans ce contexte. Le coefficient de pondération g est fixé à 1, et l'état pour le transfert est l'état $|\phi_{q+0}\rangle$.

Au temps final, nous remarquons que les populations sont différentes pour les états $|\psi_{\lambda_1}\rangle$ et $|\psi_{\lambda_2}\rangle$. Le contrôle trouvé est plus adapté au PVM de mesure que celui de la montée en échelle. Il devient possible expérimentalement de discriminer la valeur de λ .

La figure 7.5 montre l'évolution temporelle de la population associée à $|\psi_{\lambda_1}\rangle$ dans les différents ordres d'impulsion. Nous remarquons un mécanisme de montée en échelle jusqu'à environ $t_f/2$, puis une descente en échelle jusqu'à t_f .

Le but de la section suivante est de simuler un processus d'estimation expérimentale à partir d'une série de mesures.

7.3.4 Simulation d'un processus d'estimation

Nous simulons le processus d'estimation du paramètre λ dans une expérience réelle. Nous supposons qu'une première estimation de ce paramètre donne $\lambda = (1 \pm 0.3) \times 10^{-3}$ et que les autres paramètres sont parfaitement connus. Nous supposons également que la valeur



FIGURE 7.4 – (a) Évolution de l'information de Fisher classique en orange et quantique en bleu pour un contrôle de type fingerprinting avec pondération. Le trait vert pointillé correspond à la borne de la QFI. (b) Population au temps final. En bleu pour $\lambda_1 = 1 \times 10^{-3}$ et en orange pour $\lambda_2 = 1.5 \times 10^{-3}$.



FIGURE 7.5 – Évolution temporelle de la population associée à $|\psi_{\lambda_1}\rangle$, dans la base des ondes planes $|\phi_{q+n}\rangle$. Le résultat d'une optimisation par fingerprinting ressemble à un mécanisme de montée puis descente en échelle.

« vraie » de la force magnétique λ^* est égale à 1.3×10^{-3} . Nous réalisons M fois la même expérience pour un contrôle donné (soit le contrôle de la montée en échelle (7.3.2), soit le contrôle qui tend à augmenter la CFI (7.3.3), que nous nommerons u_Q et u_C respectivement). Dans un cas idéal, le résultat est le même pour chacune des réalisations. Cependant, nous prenons en compte un bruit de mesure qui perturbe le résultat de celle-ci. Pour chacun des résultats, nous utilisons un algorithme d'optimisation pour trouver le λ_m correspondant à la population observée (ajustement de courbe de la fonction de propagation des c_n en fonction de λ). La valeur estimée de λ est donnée par la moyenne des λ_m et son incertitude par l'erreur type de la moyenne.

Numériquement, nous propageons pour λ^* la dynamique et obtenons une population au temps final. Les M réalisations sont ensuite obtenues en perturbant aléatoirement la population. L'intensité de la perturbation est déterminée par un paramètre ϵ .

Nous traçons sur la figure 7.6 les histogrammes normalisés des valeurs de λ obtenues à partir des deux expériences simulées pour M = 200. Ils représentent la densité de probabilité $P_{densit}(\lambda)$ de trouver une valeur de λ avec le processus d'ajustement de courbe. Pour le contrôle u_C (courbe bleue), nous trouvons $\lambda = (1.321 \pm 0.002) \times 10^{-3}$. Pour le contrôle u_Q (courbe orange), nous trouvons deux pics aux alentours de $-\lambda^*$ et $+\lambda^*$. Cela est dû au fait que le mécanisme de montée en échelle donne le même résultat en population pour $\pm \lambda$. Cependant, connaissant la première estimation de λ , il est possible de ne considérer que le pic positif. L'estimation est alors de $\lambda = (1.552 \pm 0.027) \times 10^{-3}$. L'incertitude est donnée pour un niveau de confiance de 95%.

Comme attendu, nous remarquons que l'estimation de λ avec le contrôle u_C est bien plus précise que celle avec u_Q .

7.4 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre comment la théorie du contrôle optimal pouvait s'appliquer dans le cadre de l'estimation d'un paramètre expérimental, en particulier une force magnétique dans l'expérience BEC. Les notions d'informations de Fisher classique et quantique sont particulièrement utiles pour quantifier la précision de l'estimation.

Les premiers résultats numériques (7.3.4) montrent qu'il serait possible de mesurer avec précision la force magnétique. Un travail expérimental est en cours sur le sujet.

Notons que nous n'avons pas évoqué le lien entre interférométrie atomique et maximisation de l'information de Fisher. En effet, l'objectif est le même : estimer un paramètre expérimental. Il est donc naturel d'étudier le lien entre les deux méthodes. Nous avons vu que la maximisation de la QFI passe par un mécanisme de montée en échelle, qui correspond en fait à la première étape d'un interféromètre atomique à accélération constante (voir section 3.1.2). La figure 7.5 montre que l'algorithme GRAPE, dans sa version fingerprinting avec pondération, fournit une solution dont le mécanisme est une montée en échelle puis une descente en échelle. Ce mécanisme ressemble fortement à celui d'un interféromètre atomique dans la configuration Michelson à accélération constante présentée en section 3.7. La question ouverte qui se pose est : par construction, la méthode d'un interféromètre atomique n'est-elle pas celle qui maximise la QFI pour le PVM de mesure expérimentale ?

Une autre voie de recherche serait l'estimation simultanée de plusieurs paramètres, par exemple la force magnétique et le quasi-moment. Dans ce cas la QFI et la CFI sont généralisés par des matrices dans le cadre du concept de QFIM et de CFIM [107].



FIGURE 7.6 – Histogramme normalisé des valeurs de λ déterminées par un ajustement de courbe, pour le contrôle u_C en bleu, et pour le contrôle u_Q en orange. Les courbes continues sont des versions lissées des histogrammes, ce sont des distributions gaussiennes avec des écarts-types $\sigma = 1.27.10^{-5}$ et $\sigma = 13.58.10^{-5}$ respectivement. La ligne verticale en pointillés rouges montre la valeur de λ^* qui doit être déterminée par le processus d'estimation.

Conclusion

La modélisation de systèmes de plus en plus complexes, la résolution de problèmes d'optimisation ou encore l'estimation précise de paramètres sont autant de problèmes que les nouvelles technologies quantiques promettent de résoudre. Leur développement est intrinsèquement lié à la manipulation de systèmes quantiques [134], qu'il s'agisse d'amener le système d'un état initial à un état cible, de générer des portes pour le calcul quantique ou d'estimer la valeur d'un paramètre caractérisant le système. La théorie du contrôle optimal offre une méthode efficace et adaptable à de nombreuses situations pour répondre à ces thématiques. De plus, le contrôle optimal permet de prendre en compte les contraintes expérimentales, déterminantes pour des systèmes quantiques où la précision et la rapidité du contrôle sont des critères clés. Ces aspects sont d'autant plus importants que le contrôle est très souvent calculé en boucle ouverte. Un contrôle en boucle fermé est difficilement envisageable en contrôle quantique.

Au travers l'exemple de trois systèmes, à savoir le système quantique à deux niveaux, le système de condensat de Bose-Einstein et le circuit supraconducteur de type fluxonium, le manuscrit présente l'application du contrôle optimal à la mécanique quantique avec pour objectif des implémentations expérimentales. Dans ce contexte, deux algorithmes, la méthode de tir et GRAPE, sont utilisés pour répondre au mieux aux exigences dictées par les expériences. Rappelons quelques résultats obtenus durant cette thèse.

Nous avons montré qu'il était possible d'appliquer une généralisation du PMP pour le cas de contrôles constants par morceaux. Une méthode de tir permet de résoudre le problème pour des systèmes à deux niveaux (voir section 2.3.1). Il est alors possible d'étudier le temps minimum en fonction du pas de temps T ou du nombre de contrôles N. Cette étude se place dans le contexte des calculateurs quantiques où le temps de contrôle doit être le plus court possible afin d'éviter le phénomène de décohérence et effectuer des opérations le plus rapidement possible. Il serait intéressant de poursuivre l'étude sur des systèmes de dimensions supérieures, typiquement le système BEC étudié dans la section 3.1.1. Dans ce cas, il est beaucoup plus difficile d'initialiser la méthode de tir du fait de la grande dimension du système. Une stratégie consisterait à utiliser GRAPE afin de trouver une première approximation des inconnues de la méthode de tir.

Expérimentalement, le contrôle peut également être distordu par son passage dans un dispositif électronique, pouvant conduire à l'échec de l'expérience. Nous avons supposé que cette distorsion pouvait se décrire par une équation différentielle du 1^{er} ordre, ce qui reproduit bien les conditions expérimentales. Une nouvelle fois, la méthode de tir peut être appliquée pour calculer une solution à ce problème. Il est possible d'étudier le temps minimum de contrôle en fonction du retard τ pour un système à deux niveaux. Pour le système fluxonium, il est possible de prendre en compte ce phénomène par une généralisation de GRAPE. Les résultats numériques montrent qu'il est possible de contrôler un tel système en considérant les contraintes liées aux dispositifs expérimentaux. Pour l'instant, l'accord théorie/expérience n'est toujours pas atteint. Il reste à améliorer le modèle utilisé pour prendre en compte tous les détails expérimentaux.

Le chapitre 5 présente différents projets en lien avec l'expérience BEC. Le contrôle optimal a déjà été appliqué avec succès à cette expérience, montrant qu'il est possible d'atteindre une variété d'états cibles [61]. Dans la continuité de ce travail, nous proposons dans ce manuscrit quatre études dont l'objectif est d'améliorer la compréhension et la capacité de contrôle de cette expérience.

La stabilisation stroboscopique du système sur un état spécifique, établie dans la théorie de Floquet, est rendue possible à la fois numériquement et expérimentalement, en particulier pour des états squeezés. Une prochaine étape sera la stabilisation stroboscopique sur une superposition d'états. Des résultats numériques préliminaires ont été obtenus dans ce cadre. Pour les calculateurs quantiques, il est indispensable de pouvoir générer des portes quantiques. Celles-ci passent par le contrôle d'opérateurs unitaires. GRAPE permet, à partir de l'opérateur identité, de générer des portes de dimension d dans le cas du système BEC, autrement dit des qudits. Cependant, la mesure expérimentale ne permet d'obtenir qu'une information sur la population dans les ordres d'impulsions pour un état donné. Ainsi, pour savoir si la porte a effectivement été générée expérimentalement, il reste à déterminer une méthode efficace impliquant plusieurs mesures pour différents états initiaux, pour caractériser complètement l'opérateur unitaire.

Un condensat est constitué d'un ensemble d'atomes dans le même état quantique. Dans le contexte de l'expérience BEC, les interactions entre les atomes du condensat sont négligées dans la modélisation du système. En effet, dans cette expérience, la densité atomique est très faible et l'équation de Schrödinger suffit pour amener le système sur des états relativement « simples ». Cependant, pour des états un peu plus complexes, typiquement des états squeezés, les interactions peuvent être plus prononcées et il est nécessaire de les prendre en compte. Nous avons détaillé la version de GRAPE pour l'équation de Gross-Pitaevskii.

Finalement, nous avons proposé un modèle et une application de GRAPE pour le contrôle du condensat dans un réseau optique 2D. Les trois contrôles en phases formant le réseau optique sont optimisés. Nous avons proposé un exemple pour un transfert d'état à état. Cette étude théorique et numérique est réalisée en amont de l'extension du montage expérimental au réseau 2D.

Le chapitre 6, consacré à l'optimisation d'un interféromètre atomique, a permis d'établir une méthode novatrice pour accélérer un condensat de Bose-Einstein en ordre d'impulsion, par un réseau optique 1D contrôlé en phase et en amplitude. Cette méthode, basée sur la théorie de Floquet appliquée dans un référentiel accéléré, permet le transfert séquentiel du condensat de l'état $|2n\rangle$ à $|2(n + 1)\rangle$ dans la base propre de l'opérateur impulsion. Cette méthode permet également d'être robuste par rapport à la vitesse initiale p_0 des atomes du condensat. Cette méthode a permis expérimentalement de réaliser un transfert de 600 $\hbar k$, soit le transfert de $|0\rangle$ à $|600\rangle$. Ce type de transfert constitue le record actuel dans ce type d'expérience d'interférométrie. La robustesse vis-à-vis de l'amplitude du champ reste à étudier.

Après avoir présenté les notions d'information de Fisher classique et quantique, qui per-

mettent de quantifier le degré d'information sur la connaissance d'un paramètre, nous avons appliqué GRAPE pour estimer la force magnétique dans l'expérience BEC. Les applications numériques montrent un lien entre la maximisation de la CFI et le mécanisme utilisé par les interféromètres atomiques. Ce lien mériterait d'être exploré en profondeur. Ce projet est encore très actif puisque les premières réalisations expérimentales sont en cours à l'heure de l'écriture de la thèse.

Décrivons à présent d'autres projets à plus long terme qu'il pourrait être intéressant d'étudier. D'autres méthodes existent pour résoudre des problèmes de contrôles quantiques. Nous pouvons citer l'utilisation de l'équation de Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB) issue du principe de programmation dynamique [78], les techniques de machine learning [31, 33, 47, 68, 86, 93, 113], les techniques de passage adiabatique [80, 149, 150] et de passage adiabatique rapide [53, 81, 142, 143, 153], ou encore la méthode des impulsions composites [58, 67, 90, 141].

Avec l'explosion de l'utilisation de l'intelligence artificielle dans de nombreux domaines, il est naturel de considérer le contrôle quantique comme objet d'application, par exemple pour l'estimation de paramètres [42]. Dans ce cas, le contrôle est fixé et le réseau de neurones est entraîné à partir du modèle pour établir une relation entre un paramètre à estimer (par exemple l'offset pour un système à deux niveaux) et la distance à la cible. Ainsi, lors d'une mesure expérimentale, le réseau de neurones pourrait fournir instantanément la valeur du paramètre en fonction de la distance à la cible. Il serait intéressant de poursuivre ces recherches à la fois numériquement et expérimentalement pour différents systèmes.

Parmi ces méthodes, la résolution de l'équation HJB pour calculer la solution d'un problème de contrôle quantique semble posséder certains atouts. En effet, la solution trouvée est la solution globale du problème. De plus, cette méthode permet d'obtenir une solution pour n'importe quel état initial. Dans de nombreux domaines, l'équation HJB a permis d'établir des solutions [18, 88, 105]. Il serait donc intéressant d'approfondir son application pour les systèmes quantiques.

Finalement, toutes ces techniques aboutissent à des contrôles en boucle ouverte, ce qui correspond au fait qu'expérimentalement, seule une mesure est effectuée au temps final du processus. Cependant, il existe plusieurs situations où la mesure peut fournir une information sur le contrôle à appliquer et ainsi former un contrôle en boucle fermée. On distingue deux types de contrôles en boucle fermée en physique quantique. La première est la rétroaction par mesure (« measurement based feedback »). Dans ces cas, l'expérience est réalisée de nombreuses fois. La mesure n'est effectuée qu'au temps final. L'information obtenue par celleci est utilisée pour mettre à jour le contrôle jusqu'à la réalisation de l'objectif. L'avantage de cette méthode est qu'elle ne nécessite pas de modèle pour le système. De plus, elle est très bien adaptée aux variations des paramètres expérimentaux [43, 63]. Des méthodes comme les algorithmes génétiques peuvent être utilisées pour mettre à jour le contrôle. Puisque le temps de contrôle est très court, l'expérience avec le fluxonium se prête très bien à ce type de contrôle. Il serait intéressant de le mettre en œuvre en pratique.

Une autre approche est la rétroaction par mesure en temps réel. Dans ce cas, à l'instar des systèmes physiques classiques, la mesure est effectuée pendant le processus de contrôle (soit de manière discrète, soit de manière continue) afin d'ajuster l'évolution du système. En mécanique quantique, pour mesurer un système d'intérêt sans le projeter dans un état spécifique en vertu du postulat de la réduction du paquet d'onde, il est nécessaire de mesurer un système sonde qui a interagi au préalable avec le système d'intérêt. Des expériences de ce type ont montré qu'il était possible d'atteindre et de stabiliser le système sur un état cible, par contrôle en boucle fermée [56]. Un contrôle en boucle fermée en temps réel permet d'être très peu sensible aux variations des paramètres expérimentaux et ainsi d'obtenir une expérience très reproductible. Ceci constitue une méthode très prometteuse pour le développement de nouvelles technologies. Dans ce contexte, une version de GRAPE a été développée [123] et il serait pertinent d'approfondir ces résultats avec des exemples d'applications numériques sur différents systèmes quantiques.

Cette annexe a pour but de présenter les codes écrits pendant la thèse. L'objectif de ces codes est de calculer un contrôle optimal pour la manipulation de systèmes quantiques. Ils reposent sur l'algorithme GRAPE ou la méthode de tir. Les systèmes quantiques sont ceux présentés dans le manuscrit. Le fichier source de ces codes se trouve sur la page GitHub suivante : https://github.com/edionis/QuantumControlAlgorithms.git

Tous les codes sont écrits en Python. En dehors du package Nutopy [41] nécessaire aux codes $TIR_nutopy.py$ et $TIR_discret.py$, les autres codes ne requièrent aucun module spécifique en dehors de ceux de la bibliothèque standard de Python. Python est utilisé dans sa version 3.10.9.

Ci-dessous la description des codes :

- TIR_nutopy.py et TIR_scipy.py permettent de résoudre à l'aide d'une méthode de tir l'exemple du système à deux niveaux avec deux paramètres de contrôle de la section 2.3.1. La fonction « dynamics » est le système extrémal du problème. La fonction « shooting_function » est la fonction de tir G. La racine de cette fonction est déterminée respectivement par la fonction « nle.solve » du module Nutopy ou par la fonction « root » du module scipy.
- 2. *TIR_discret.py* donne l'algorithme de la méthode de tir dans le cas d'un contrôle discret (section 4.1.2), toujours pour l'exemple du système à deux niveaux avec deux paramètres de contrôle du chapitre 2.3.1. Le code est construit de la même manière que *TIR_nutopy.py*.
- 3. $GRAPE_bec.py$ implémente l'algorithme GRAPE pour le transfert d'état à état dans le cas de BEC dans un réseau optique unidimensionnel. Les résultats sont ceux présentés à la section 3.1.1. Le code est divisé en plusieurs sections. La première est une classe « BEC » qui génère, à partir de la dimension du système $N = 2n_{max} + 1$, de la valeur du quasi-moment q et de la profondeur du réseau s, l'Hamiltonien du système (les matrices H_0, H_1 et H_2). La deuxième section est la classe « propagation » qui définit les fonctions renvoyant la fidélité F_1 et la correction à apporter au contrôle donné par le PMP. La troisième section regroupe toutes les fonctions du code. La quatrième section décrit les paramètres du système, les constantes, le temps de contrôle, les valeurs de q et s, l'état initial et la condition initiale sur le contrôle. La cinquième section vise à calculer le contrôle optimal. L'algorithme scipy.optimize.minimize est utilisé pour trouver de manière itérative la solution au problème de transfert d'état à état, où la fonction à minimiser est « Cost » et le gradient « dCost » (basé sur la classe « propagation »).

L'algorithme utilise une méthode L-BFGS-B, il s'agit donc d'un algorithme du second ordre puisque la Hessienne est approximée de manière itérative à chaque étape. L'utilisateur peut définir un nombre maximum d'itérations, une tolérance et une contrainte sur le contrôle. La sixième section affiche les résultats des trois transferts, à savoir les contrôles, la population $|c_{q,n}|^2$ et la densité de probabilité, ainsi que leur représentation de Husimi.

- 4. $GRAPE_bec_porte.py$ propose pour le système BEC une version de GRAPE pour le contrôle optimal de portes quantiques (chapitre 5.2) dans le cas de la fidélité F_1 . Le code possède la même structure que $GRAPE_bec.py$.
- 5. $GRAPE_bec_GP.py$ permet d'appliquer GRAPE au cas de l'équation de Gross-Pitaevskii pour un transfert d'état à état pour la fidélité F_1 (chapitre 5.3). L'état initial est $|\phi_{0+0}\rangle$ et l'état cible, l'état squeezé $|g(0,0,1.5)\rangle$. Le code possède la même structure que $GRAPE_bec.py$.
- 6. $GRAPE_bec_2D.py$. Ce code repose sur l'utilisation de GRAPE pour effectuer un transfert d'état à état dans le cas du contrôle d'un condensat de Bose-Einstein, dans un réseau optique 2D (chapitre 5.4) et une fidélité F_1 . L'état initial est $|0,0\rangle$ et l'état cible $\frac{1}{\sqrt{2}}(|-3,-3\rangle + |3,3\rangle)$. La fonction « get_GRAPE » permet de calculer la mise à jour des contrôles $\varphi_{12}, \varphi_{23}, \varphi_{31}$ et des pas ϵ associés par une recherche linéaire respectant le critère de Wolfe [154].
- 7. $GRAPE_bec_estimation.py$ présente la version de GRAPE adaptée à la fidélité de type fingerprinting avec pondération présentée au chapitre 7.2.2. Le but est d'estimer la valeur de la force magnétique λ . Les fonctions « CFI » et « QFI » permettent de calculer l'information de Fisher classique et quantique à tout instant du processus de contrôle. Le code possède la même structure que $GRAPE_bec.py$.
- 8. $GRAPE_bec_robuste.py$ permet de résoudre un transfert d'état à état robuste par rapport à l'impulsion initial p_0 . Le système étudié est celui du système de l'interférométrie atomique présentée au chapitre 3.1.2. L'état initial est $|0 + p_0\rangle$ et l'état cible, l'état squeezé $|g(0, 0, 1.5)\rangle$. Le contrôle est robuste pour une valeur p_0 selon une distribution normale de moyenne $\mu = 0$ et d'écart-type $\sigma_p = 0.3$. Le système est contrôlé en fréquence $\omega(t)$ et amplitude $\gamma(t)$. La fonction « get_GRAPE » permet de calculer la mise à jour des contrôles et des pas ϵ associés par une recherche linéaire respectant le critère de Wolfe.
- 9. $GRAPE_fluxonium_distorsion.py$ repose sur l'utilisation de GRAPE pour un transfert d'état à état dans le cas du système fluxonium avec prise en compte d'une distorsion sur le contrôle. Les résultats présentés sont ceux de la section 4.2.4 (figure 4.6b). Le but est d'atteindre le premier état excité $|\zeta_1\rangle$ depuis l'état fondamental $|\zeta_0\rangle$. Le retard est de $\tau = 0.1 ns$, le pas de discrétisation du contrôle T = 0.5 ns et le temps final de $t_f = 10 ns$.

Bibliographie

- [1] ABEND, S., ET AL. Terrestrial very-long-baseline atom interferometry : Workshop summary. AVS Quantum Science 6, 2 (05 2024), 024701. 98
- [2] ACÍN, A., BLOCH, I., BUHRMAN, H., CALARCO, T., EICHLER, C., EISERT, J., ES-TEVE, D., GISIN, N., GLASER, S. J., JELEZKO, F., ET AL. The quantum technologies roadmap : a european community view. New Journal of Physics 20, 8 (2018), 080201. 11, 17
- [3] ALIPOUR, S., MEHBOUDI, M., AND REZAKHANI, A. T. Quantum metrology in open systems : Dissipative cramér-rao bound. *Phys. Rev. Lett.* 112 (Mar 2014), 120405. 115
- [4] ALTMAN, E., ET AL. Quantum simulators : Architectures and opportunities. PRX Quantum 2 (Feb 2021), 017003. 40
- [5] ANSEL, Q., DIONIS, E., ARROUAS, F., PEAUDECERF, B., GUÉRIN, S., GUÉRY-ODELIN, D., AND SUGNY, D. Introduction to theoretical and experimental aspects of quantum optimal control. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 57*, 13 (jun 2024), 133001. 15, 25, 33, 36, 43, 45, 46
- [6] ANSEL, Q., DIONIS, E., AND SUGNY, D. Optimal control strategies for parameter estimation of quantum systems. *SciPost Phys.* 16 (2024), 013. 15, 118, 122, 125
- [7] ANSEL, Q., TESCH, M., GLASER, S. J., AND SUGNY, D. Optimizing fingerprinting experiments for parameter identification : Application to spin systems. *Phys. Rev. A* 96 (Nov 2017), 053419. 124
- [8] ARROUAS, F., OMBREDANE, N., GABARDOS, L., DIONIS, E., DUPONT, N., BILLY, J., PEAUDECERF, B., SUGNY, D., AND GUÉRY-ODELIN, D. Floquet operator engineering for quantum state stroboscopic stabilization. *Comptes Rendus. Physique 24*, S3 (2023), 173–185. 14, 78, 80, 101
- [9] ASSLÄNDER, J. A perspective on mr fingerprinting. Journal of Magnetic Resonance Imaging 53, 3 (2021), 676–685. 124
- [10] BASILEWITSCH, D., YUAN, H., AND KOCH, C. P. Optimally controlled quantum discrimination and estimation. *Phys. Rev. Res.* 2 (Sep 2020), 033396. 116
- [11] BECHER, C., GAO, W., KAR, S., MARCINIAK, C. D., MONZ, T., BARTHOLOMEW, J. G., GOLDNER, P., LOH, H., MARCELLINA, E., GOH, K. E. J., ET AL. 2023 roadmap for materials for quantum technologies. *Materials for Quantum Technology* 3, 1 (2023), 012501. 17

- [12] BÉGUIN, A., RODZINKA, T., CALMELS, L., ALLARD, B., AND GAUGUET, A. Atom interferometry with coherent enhancement of bragg pulse sequences. *Phys. Rev. Lett.* 131 (Oct 2023), 143401. 98
- [13] BÉGUIN, A., RODZINKA, T., VIGUÉ, J., ALLARD, B., AND GAUGUET, A. Characterization of an atom interferometer in the quasi-bragg regime. *Phys. Rev. A* 105 (Mar 2022), 033302. 50
- [14] BELLMAN, R. Dynamic Programming, 1 ed. Princeton University Press, Princeton, NJ, USA, 1957. 11, 29
- [15] BERTSEKAS, D. P. Dynamic Programming and Optimal Control. Athena Scientific, Belmont, Massachusetts, 2020. 29
- [16] BILLY, J., JOSSE, V., ZUO, Z., BERNARD, A., HAMBRECHT, B., LUGAN, P., CLÉ-MENT, D., SANCHEZ-PALENCIA, L., BOUYER, P., AND ASPECT, A. Direct observation of anderson localization of matter waves in a controlled disorder. *Nature 453*, 7197 (Jun 2008), 891–894. Research Support, Non-U.S. Gov't. 40
- [17] BOCK, H. G., AND PLITT, K.-J. A multiple shooting algorithm for direct solution of optimal control problems. *IFAC Proceedings Volumes* 17, 2 (1984), 1603–1608. 29
- [18] BOKANOWSKI, O., DÉSILLES, A., AND ZIDANI, H. Global optimization approach for the ascent problem of multi-stage launchers. *Modeling, Simulation and Optimization* of Complex Processes HPSC 2018. Springer, Cham. (2021), 1–42. 137
- [19] BONNANS, F., GRELARD, V., AND MARTINON, P. BOCOP : an open source toolbox for optimal control. http://bocop.org, Inria Saclay, Paris, 2017. 29
- [20] BONNANS, F., AND ROUCHON, P. Commande et optimisation de systèmes dynamiques. Éditions de l'École Polytechnique, Palaiseau, France, 2006. 29
- [21] BOSCAIN, U., SIGALOTTI, M., AND SUGNY, D. Introduction to the pontryagin maximum principle for quantum optimal control. *PRX Quantum 2* (Sep 2021), 030203. 30, 32, 66
- [22] BOURDIN, L., AND TRÉLAT, E. Pontryagin maximum principle for optimal sampleddata control problems. *IFAC-PapersOnLine* 48, 25 (2015), 80–84. 16th IFAC Workshop on Control Applications of Optimization CAO'2015. 59, 60
- [23] BOURDIN, L., AND TRÉLAT, E. Optimal sampled-data control, and generalizations on time scales. *Mathematical Control and Related Fields* 6, 1 (2016), 53–94. 60
- [24] BOURDIN, L., AND TRÉLAT, E. Linear-quadratic optimal sampled-data control problems : Convergence result and riccati theory. Automatica 79 (2017), 273–281. 60
- [25] BRAUNSTEIN, S. L., AND CAVES, C. M. Statistical distance and the geometry of quantum states. *Phys. Rev. Lett.* 72 (May 1994), 3439–3443. 115, 122
- [26] BRAUNSTEIN, S. L., AND CAVES, C. M. Statistical distance and the geometry of quantum states. *Phys. Rev. Lett.* 72 (May 1994), 3439–3443. 116
- [27] BROYDEN, C. G. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. Mathematics of Computation 19 (1965), 577–593. 29, 36
- [28] BRYSON, A. E. Applied optimal control : optimization, estimation and control. CRC Press, New York, 1975. 12, 24
- [29] BRYSON, A. E. Optimal control-1950 to 1985. *IEEE Control Systems Magazine 16*, 3 (1996), 26–33.

- [30] BUKOV, M., D'ALESSIO, L., AND POLKOVNIKOV, A. Universal high-frequency behavior of periodically driven systems : from dynamical stabilization to floquet engineering. Advances in Physics 64 (2015), 139–226. 78
- [31] BUKOV, M., DAY, A., SELS, D., WEINBERG, P., POLKOVNIKOV, A., AND MEHTA, P. Reinforcement learning in different phases of quantum control. *Phys. Rev. X 8* (2018), 031086. 137
- [32] CARCASSI, G., MACCONE, L., AND AIDALA, C. A. Four postulates of quantum mechanics are three. *Phys. Rev. Lett.* 126 (Mar 2021), 110402. 18
- [33] CARLEO, G., CIRAC, I., CRANMER, K., DAUDET, L., SCHULD, M., TISHBY, N., VOGT-MARANTO, L., AND ZDEBOROVÁ, L. Machine learning and the physical sciences. *Rev. Mod. Phys.* 91 (2019), 045002. 137
- [34] CHATELAIN, G. Façonnage d'ondes de matière dans un réseau optique dépendant du temps : du chaos quantique au contrôle quantique. PhD thesis, 2021. Thèse de doctorat dirigée par Guéry-Odelin, David Physique de la Matière Toulouse 3 2021. 40
- [35] CHIOW, S.-W., KOVACHY, T., CHIEN, H.-C., AND KASEVICH, M. A. 102ħk Large Area Atom Interferometers. Phys. Rev. Lett. 107 (Sep 2011), 130403. 98
- [36] CLADÉ, P., GUELLATI-KHÉLIFA, S., NEZ, F., AND BIRABEN, F. Large Momentum Beam Splitter Using Bloch Oscillations. *Phys. Rev. Lett.* 102 (Jun 2009), 240402. 98
- [37] COHEN, O., ZHU, B., AND ROSEN, M. S. Mr fingerprinting deep reconstruction network (drone). *Magnetic resonance in medicine 80*, 3 (2018), 885–894. 124
- [38] COHEN-TANNOUDJI, C., DIU, B., AND LALOË, F. Mécanique Quantique Tome 1. EDP Sciences, Les Ulis, 2018. 11, 18, 19, 20
- [39] CONTRERAS, M., PELLICER, R., AND VILLENA, M. Dynamic optimization and its relation to classical and quantum constrained systems. *Physica A : Statistical Mechanics* and its Applications 479 (2017), 12–25. 25
- [40] COTS, O. Contrôle optimal géométrique : méthodes homotopiques et applications. PhD thesis, 2012. Thèse de doctorat dirigée par Caillau, Jean-Baptiste et Gergaud, Joseph Mathématiques Dijon 2012. 29
- [41] COTS, O. Nutopy. https://ct.gitlabpages.inria.fr/nutopy/, Institut de recherche en informatique, Toulouse, 2023. 29, 139
- [42] COUTURIER, R., DIONIS, E., GUÉRIN, S., GUYEUX, C., AND SUGNY, D. Characterization of a driven two-level quantum system by supervised learning. *Entropy* 25, 3 (2023). 137
- [43] CREEVEY, F. M., HILL, C. D., AND HOLLENBERG, L. C. L. Gasp : a genetic algorithm for state preparation on quantum computers. *Scientific Reports 13*, 1 (July 2023), 11956. 137
- [44] D'ALESSANDRO, D. Introduction to quantum control and dynamics. Chapman & Hall/CRC applied mathematics & nonlinear science. Taylor & Francis Ltd, Hoboken, NJ, 2007. 11
- [45] DALIBARD, J. Atomes et rayonnement : Leçon inaugurale prononcée le jeudi 18 avril 2013. No. 237 in Leçons Inaugurales du Collège de France. Collège de France / Fayard, 2013. 42, 91, 98
- [46] DALIBARD, J., GERBIER, F., JUZELIŪNAS, G., AND ÖHBERG, P. Colloquium : Artificial gauge potentials for neutral atoms. *Rev. Mod. Phys.* 83 (Nov 2011), 1523– 1543. 77, 78
- [47] DAY, A., BUKOV, M., WEINBERG, P., MEHTA, P., AND SELS, D. Reinforcement Learning in Different Phases of Quantum Control. *Phys. Rev. Lett.* 122 (2019), 020601. 137
- [48] DE FOUQUIERES, P., SCHIRMER, S., GLASER, S., AND KUPROV, I. Second order gradient ascent pulse engineering. *Journal of Magnetic Resonance 212*, 2 (2011), 412– 417. 36
- [49] DE GROOT, P. A review of selected topics in interferometric optical metrology. *Reports on Progress in Physics 32* (04 2019), 82. 48
- [50] DEFFNER, S. Nonlinear speed-ups in ultracold quantum gases. *Europhysics Letters* 140, 4 (nov 2022), 48001. 84
- [51] DEFFNER, S., AND CAMPBELL, S. Quantum speed limits : from Heisenberg's uncertainty principle to optimal quantum control. J. Phys. A. Math. Theor. 50 (2017), 453001. 80
- [52] DEGEN, C. L., REINHARD, F., AND CAPPELLARO, P. Quantum sensing. Rev. Mod. Phys. 89 (Jul 2017), 035002. 115
- [53] DEL CAMPO, A. Shortcuts to adiabaticity by counterdiabatic driving. Phys. Rev. Lett. 111 (Sep 2013), 100502. 112, 137
- [54] DIONIS, E., AND SUGNY, D. Sequential versus concurrent gradient-based optimal algorithms for the robust control of quantum systems. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 55*, 18 (aug 2022), 184006. 14, 108
- [55] DIONIS, E., AND SUGNY, D. Time-optimal control of two-level quantum systems by piecewise constant pulses. *Phys. Rev. A* 107 (Mar 2023), 032613. 14, 60
- [56] DOTSENKO, I., SAYRIN, C., ZHOU, X., PEAUDECERF, B., RYBARCZYK, T., GLEYZES, S., ROUCHON, P., MIRRAHIMI, M., AMINI, H., BRUNE, M., RAIMOND, J.-M., AND HAROCHE, S. Real-time quantum feedback prepares and stabilizes photon number states. *Nature* 477, 7362 (2011), 73–77. 12, 138
- [57] DOWLING, J. P., AND MILBURN, G. J. Quantum technology : the second quantum revolution. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences 361*, 1809 (2003), 1655–1674. 11
- [58] DRIDI, G., MEJATTY, M., GLASER, S. J., AND SUGNY, D. Robust control of a not gate by composite pulses. *Phys. Rev. A 101* (Jan 2020), 012321. 137
- [59] DUPONT, N. Contrôle et transport d'ondes de matière dans un réseau optique : contrôle optimal, effet ratchet et étude de l'émergence d'un ordre supercristallin. PhD thesis, 2022. Thèse de doctorat dirigée par Guéry-Odelin, David Physique Toulouse 3 2022. 40
- [60] DUPONT, N., ARROUAS, F., GABARDOS, L., OMBREDANE, N., BILLY, J., PEAU-DECERF, B., SUGNY, D., AND GUÉRY-ODELIN, D. Phase-space distributions of bose-einstein condensates in an optical lattice : optimal shaping and reconstruction. *New Journal of Physics 25*, 1 (jan 2023), 013012. 48, 101

- [61] DUPONT, N., CHATELAIN, G., GABARDOS, L., ARNAL, M., BILLY, J., PEAUDE-CERF, B., SUGNY, D., AND GUÉRY-ODELIN, D. Quantum state control of a boseeinstein condensate in an optical lattice. *PRX Quantum 2* (Oct 2021), 040303. 42, 45, 77, 91, 95, 136
- [62] DUPONT, N., GABARDOS, L., ARROUAS, F., OMBREDANE, N., BILLY, J., PEAUDE-CERF, B., AND GUÉRY-ODELIN, D. Hamiltonian ratchet for matter-wave transport. *Phys. Rev. Lett.* 131 (Sep 2023), 133401. 96
- [63] EGGER, D. J., AND WILHELM, F. K. Adaptive hybrid optimal quantum control for imprecisely characterized systems. *Phys. Rev. Lett.* 112 (Jun 2014), 240503. 137
- [64] FITZEK, F., KIRSTEN-SIEMSS, J.-N., RASEL, E. M., GAALOUL, N., AND HAMME-RER, K. Accurate and efficient bloch-oscillation-enhanced atom interferometry. *Phys. Rev. Res.* 6 (Aug 2024), L032028. 112
- [65] FORTUN, A., CABRERA-GUTIÉRREZ, C., CONDON, G., MICHON, E., BILLY, J., AND GUÉRY-ODELIN, D. Direct tunneling delay time measurement in an optical lattice. *Phys. Rev. Lett.* 117 (Jun 2016), 010401. 40, 42, 67
- [66] FROMONTEIL, C., TRICARICO, R., CESA, F., AND PICHLER, H. Hamilton-jacobibellman equations for rydberg-blockade processes. *Phys. Rev. Res.* 6 (Sep 2024), 033333. 31
- [67] GENOV, G. T., SCHRAFT, D., HALFMANN, T., AND VITANOV, N. V. Correction of arbitrary field errors in population inversion of quantum systems by universal composite pulses. *Phys. Rev. Lett.* 113 (Jul 2014), 043001. 137
- [68] GIANNELLI, L., SGROI, P., BROWN, J., PARAOANU, G., PATERNOSTRO, M., PALA-DINO, E., AND FALCI, G. A tutorial on optimal control and reinforcement learning methods for quantum technologies. *Phys. Lett. A* 434 (2022), 128054. 137
- [69] GIFTTHALER, M., NEUNERT, M., STÄUBLE, M., BUCHLI, J., AND DIEHL, M. A family of iterative gauss-newton shooting methods for nonlinear optimal control. In 2018 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS) (2018), IEEE, pp. 1–9. 29
- [70] GIOVANNETTI, V., LLOYD, S., AND MACCONE, L. Quantum-enhanced measurements : Beating the standard quantum limit. *Science 306*, 5700 (2004), 1330–1336. 115
- [71] GIOVANNETTI, V., LLOYD, S., AND MACCONE, L. Advances in quantum metrology. *Nature Photonics* 5 (2011), 222–229. 115
- [72] GIRVIN, S. M. Circuit QED : superconducting qubits coupled to microwave photons. In Quantum Machines : Measurement and Control of Engineered Quantum Systems : Lecture Notes of the Les Houches Summer School : Volume 96, July 2011. Oxford University Press, 06 2014. 53
- [73] GOERZ, M. H., BASILEWITSCH, D., GAGO-ENCINAS, F., KRAUSS, M. G., HORN, K. P., REICH, D. M., AND KOCH, C. P. Krotov : A Python implementation of Krotov's method for quantum optimal control. *SciPost Phys.* 7 (2019), 080. 105
- [74] GOERZ, M. H., HALPERIN, E. J., AYTAC, J. M., KOCH, C. P., AND WHALEY, K. B. Robustness of high-fidelity rydberg gates with single-site addressability. *Phys. Rev. A 90* (Sep 2014), 032329. 105

- [75] GOERZ, M. H., KASEVICH, M. A., AND MALINOVSKY, V. S. Robust optimized pulse schemes for atomic fountain interferometry. *Atoms* 11, 2 (2023). 98
- [76] GOLDMAN, N., AND DALIBARD, J. Periodically driven quantum systems : Effective hamiltonians and engineered gauge fields. *Phys. Rev. X* 4 (Aug 2014), 031027. 77, 78, 96
- [77] GOODWIN, D. L., AND KUPROV, I. Auxiliary matrix formalism for interaction representation transformations, optimal control, and spin relaxation theories. *The Journal* of Chemical Physics 143, 8 (08 2015), 084113. 34
- [78] GOUGH, J., BELAVKIN, V. P., AND SMOLYANOV, O. G. Hamilton-jacobi-bellman equations for quantum optimal feedback control. *Journal of Optics B : Quantum and Semiclassical Optics 7*, 10 (sep 2005), S237. 137
- [79] GROSS, C., AND BLOCH, I. Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices. Science 357, 6355 (2017), 995–1001. 40
- [80] GUÉRIN, S., HAKOBYAN, V., AND JAUSLIN, H. R. Optimal adiabatic passage by shaped pulses : Efficiency and robustness. *Phys. Rev. A* 84 (Jul 2011), 013423. 137
- [81] GUÉRY-ODELIN, D., RUSCHHAUPT, A., KIELY, A., TORRONTEGUI, E., MARTÍNEZ-GARAOT, S., AND MUGA, J. G. Shortcuts to adiabaticity : Concepts, methods, and applications. *Rev. Mod. Phys. 91* (2019), 045001. 112, 137
- [82] GUÉRIN, S., AND JAUSLIN, H. Grid methods and hilbert space basis for simulations of quantum dynamics. *Computer Physics Communications* 121-122 (1999), 496–498. Proceedings of the Europhysics Conference on Computational Physics CCP 1998. 85
- [83] HAROCHE, S., AND RAIMOND, J.-M. Exploring the Quantum : Atoms, Cavities, and Photons. Oxford University Press, 08 2006. 46
- [84] HELSTROM, C. W. Quantum detection and estimation theory. Journal of Statistical Physics 1 (1969), 231–252. 115
- [85] HELSTROM, C. W. Cramér-rao inequalities for operator-valued measures in quantum mechanics. International Journal of Theoretical Physics 8 (1973), 361–376. 115
- [86] HUSH, M. Machine learning for quantum physics. Science 355 (2017), 580. 137
- [87] HUSIMI, K. Some formal properties of the density matrix. Proceedings of the Physico-Mathematical Society of Japan. 3rd Series 22, 4 (1940), 264–314. 46
- [88] IMBERT, C., MONNEAU, R., AND ZIDANI, H. A hamilton-jacobi approach to junction problems and application to traffic flows. ESAIM : Control, Optimisation, and Calculus of Variations. 19(01) (2013), 129–166. 137
- [89] IMPENS, F., AND GUÉRY-ODELIN, D. Multichromatic floquet engineering of quantum dissipation. preprint arXiv :2306.01676 (2024). 78
- [90] IVANOV, S. S., TOROSOV, B. T., AND VITANOV, N. V. High-fidelity quantum control by polychromatic pulse trains. *Phys. Rev. Lett.* 129 (Dec 2022), 240505. 137
- [91] JÄGER, G., REICH, D. M., GOERZ, M. H., KOCH, C. P., AND HOHENESTER, U. Optimal quantum control of bose-einstein condensates in magnetic microtraps : Comparison of gradient-ascent-pulse-engineering and krotov optimization schemes. *Phys. Rev. A 90* (Sep 2014), 033628. 84
- [92] JONES, J. Course 10 nuclear magnetic resonance quantum computation. In *Quantum Entanglement and Information Processing*, D. Estève, J.-M. Raimond, and J. Dalibard, Eds., vol. 79 of *Les Houches*. Elsevier, 2004, pp. 357–400. 18

- [93] KHALID, I., WEIDNER, C. A., JONCKHEERE, E. A., SCHIRMER, S. G., AND LANG-BEIN, F. C. Sample-efficient model-based reinforcement learning for quantum control. *Phys. Rev. Res.* 5 (Oct 2023), 043002. 137
- [94] KHANEJA, N., REISS, T., KEHLET, C., SCHULTE-HERBRÜGGEN, T., AND GLASER, S. J. Optimal control of coupled spin dynamics : design of NMR pulse sequences by gradient ascent algorithms. J. Magn. Res. 172, 2 (Feb. 2005), 296–305. 33, 98, 105
- [95] KIRK, D. E. Optimal control theory : an introduction. Courier Corporation, New York, 2004. 24
- [96] KITTEL, C. Introduction to Solid State Physics, 8th ed. Wiley, Hoboken, NJ, 2005. Professor Emeritus University of California, Berkeley. 42
- [97] KOBZAR, K., EHNI, S., SKINNER, T. E., GLASER, S. J., AND LUY, B. Exploring the limits of broadband 90 and 180 universal rotation pulses. *Journal of Magnetic Resonance 225* (2012), 142–160. 98
- [98] KOBZAR, K., SKINNER, T., KHANEJA, N., GLASER, S., AND LUY, B. Exploring the limits of broadband excitation and inversion : Ii. rf-power optimized pulses. *Journal of Magnetic Resonance* 194 (09 2008), 58–66. 76
- [99] KOCH, C. P., BOSCAIN, U., CALARCO, T., DIRR, G., FILIPP, S., GLASER, S. J., KOSLOFF, R., MONTANGERO, S., SCHULTE-HERBRÜGGEN, T., SUGNY, D., AND WILHELM, F. K. Quantum optimal control in quantum technologies. strategic report on current status, visions and goals for research in europe. *EPJ Quantum Technology* 9 (July 2022), 19. 12, 45, 105
- [100] KOCH, C. P., LEMESHKO, M., AND SUGNY, D. Quantum control of molecular rotation. Rev. Mod. Phys. 91 (2019), 035005. 17
- [101] KOVACHY, T., CHIOW, S.-W., AND KASEVICH, M. A. Adiabatic-rapid-passage multiphoton bragg atom optics. *Phys. Rev. A 86* (Jul 2012), 011606. 100
- [102] KURIZKI, G., BERTET, P., KUBO, Y., MØLMER, K., PETROSYAN, D., RABL, P., AND SCHMIEDMAYER, J. Quantum technologies with hybrid systems. *Proceedings of* the National Academy of Sciences 112, 13 (2015), 3866–3873. 17
- [103] LAPERT, M. Développement de nouvelles techniques de contrôle optimal en dynamique quantique : de la Résonance Magnétique Nucléaire à la physique moléculaire. PhD thesis, 2011. Thèse de doctorat dirigée par Sugny, Dominique Physique Dijon 2011. 18
- [104] LEVITT, M. H. Spin dynamics : basics of nuclear magnetic resonance. John Wiley & Sons, 2013. 18
- [105] LI, W., AND WANG, S. Penalty approach to the hjb equation arising in european stock option pricing with proportional transaction costs. *Journal of Optimization Theory and Applications* 143, 2 (Nov 2009), 279–293. 137
- [106] LIBERZON, D. Calculus of Variations and Optimal Control Theory : A Concise Introduction. Princeton University Press, 2012. 25
- [107] LIU, J., YUAN, H., LU, X.-M., AND WANG, X. Quantum fisher information matrix and multiparameter estimation. Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical 53, 2 (dec 2019), 023001. 132
- [108] LIU, J., ZHANG, M., CHEN, H., WANG, L., AND YUAN, H. Optimal scheme for quantum metrology. Advanced Quantum Technologies 5, 1 (2022), 2100080. 115

- [109] MA, D., GULANI, V., SEIBERLICH, N., LIU, K., SUNSHINE, J. L., DUERK, J. L., AND GRISWOLD, M. A. Magnetic resonance fingerprinting. *Nature* 495, 7440 (2013), 187–192. 124
- [110] MARTIKYAN, V. Optimal control and shortcuts to adiabaticity techniques in linear and non-linear systems : from ion cyclotron resonance to nuclear magnetic resonance. PhD thesis, 2021. Thèse de doctorat dirigée par Sugny, Dominique Physique Bourgogne Franche-Comté 2021. 112
- [111] MAXWELL, J. C. I. on governors. Proceedings of the Royal Society of London 16 (1868), 270–283. 11
- [112] MCDONALD, G. D., KUHN, C. C. N., BENNETTS, S., DEBS, J. E., HARDMAN, K. S., JOHNSSON, M., CLOSE, J. D., AND ROBINS, N. P. 80ħk momentum separation with Bloch oscillations in an optically guided atom interferometer. *Phys. Rev. A* 88 (Nov 2013), 053620. 98
- [113] MEHTA, P., BUKOV, M., WANG, C., DAY, A., RICHARDSON, C., FISHER, C., AND SCHWAB, D. A high-bias, low-variance introduction to machine learning for physicists. *Phys. Rep.* 810 (2019), 1. 137
- [114] MOTZOI, F., GAMBETTA, J. M., MERKEL, S. T., AND WILHELM, F. K. Optimal control methods for rapidly time-varying hamiltonians. *Phys. Rev. A* 84 (Aug 2011), 022307. 67
- [115] NARDECCHIA, I. Detecting gravitational waves with advanced virgo. Galaxies 10, 1 (2022). 48
- [116] NGUYEN, L. B., KOOLSTRA, G., KIM, Y., MORVAN, A., CHISTOLINI, T., SINGH, S., NESTEROV, K. N., JÜNGER, C., CHEN, L., PEDRAMRAZI, Z., MITCHELL, B. K., KREIKEBAUM, J. M., PURI, S., SANTIAGO, D. I., AND SIDDIQI, I. Blueprint for a high-performance fluxonium quantum processor. *PRX Quantum 3* (Aug 2022), 037001. 54
- [117] PAGEL, Z., ZHONG, W., PARKER, R. H., OLUND, C. T., YAO, N. Y., AND MÜLLER, H. Symmetric Bloch oscillations of matter waves. *Phys. Rev. A 102* (Nov 2020), 053312.
 98
- [118] PALAO, J. P., AND KOSLOFF, R. Quantum computing by an optimal control algorithm for unitary transformations. *Physical Review Letters* 89, 18 (Oct 2002), 188301. Epub 2002 Oct 14. 83
- [119] PALAO, J. P., AND KOSLOFF, R. Optimal control theory for unitary transformations. *Phys. Rev. A 68* (Dec 2003), 062308. 83
- [120] PENASA, M., GERLICH, S., RYBARCZYK, T., MÉTILLON, V., BRUNE, M., RAI-MOND, J. M., HAROCHE, S., DAVIDOVICH, L., AND DOTSENKO, I. Measurement of a microwave field amplitude beyond the standard quantum limit. *Phys. Rev. A 94* (Aug 2016), 022313. 115
- [121] PESCH, H. J., AND PLAIL, M. The maximum principle of optimal control : A history of ingenious ideas and missed opportunities. *Control and Cybernetics* 38 (01 2009). 11
- [122] PLOTKIN-SWING, B., GOCHNAUER, D., MCALPINE, K. E., COOPER, E. S., JAMI-SON, A. O., AND GUPTA, S. Three-Path Atom Interferometry with Large Momentum Separation. *Phys. Rev. Lett.* 121 (Sep 2018), 133201. 98

- [123] POROTTI, R., PEANO, V., AND MARQUARDT, F. Gradient-ascent pulse engineering with feedback. *PRX Quantum* 4 (Jul 2023), 030305. 138
- [124] PYKETT, I. Nmr imaging in medicine. Sci. Am 246 (1982), 78–91. 24
- [125] RABI, I. I. On the process of space quantization. Phys. Rev. 49 (Feb 1936), 324–328.
 18
- [126] RABI, I. I. Space quantization in a gyrating magnetic field. Phys. Rev. 51 (Apr 1937), 652–654. 18
- [127] RAIMOND, J.-M., AND HAROCHE, S. Exploring the quantum. Oxford University Press 82 (2006), 86. 17
- [128] REICH, D. M., NDONG, M., AND KOCH, C. P. Monotonically convergent optimization in quantum control using krotov's method. *The Journal of Chemical Physics 136*, 10 (03 2012), 104103. 37
- [129] RICE, S. A., AND ZHAO, M. Optimal Control of Molecular Dynamics. John Wiley and Sons, New York, 2000. 17
- [130] RODZINKA, T., DIONIS, E., CALMELS, L., BELDJOUDI, S., BÉGUIN, A., GUÉRY-ODELIN, D., ALLARD, B., SUGNY, D., AND GAUGUET, A. Optimal floquet engineering for large scale atom interferometers. arXiv :2403.14337 (2024). 15, 112, 114
- [131] RUDOLPH, J., WILKASON, T., NANTEL, M., SWAN, H., HOLLAND, C. M., JIANG, Y., GARBER, B. E., CARMAN, S. P., AND HOGAN, J. M. Large Momentum Transfer Clock Atom Interferometry on the 689 nm Intercombination Line of Strontium. *Phys. Rev. Lett.* 124 (Feb 2020), 083604. 98
- [132] SCHIRK, J., WALLNER, F., HUANG, L., TSITSILIN, I., BRUCKMOSER, N., KOCH, L., BUNCH, D., GLASER, N. J., HUBER, G. B. P., KNUDSEN, M., KRYLOV, G., MARX, A., PFEIFFER, F., RICHARD, L., ROY, F. A., ROMEIRO, J. H., SINGH, M., SÖDERGREN, L., DIONIS, E., SUGNY, D., WERNINGHAUS, M., LIEGENER, K., SCHNEIDER, C. M. F., AND FILIPP, S. Protected fluxonium control with sub-harmonic parametric driving. arXiv :2410.00495 (2024). 54
- [133] SCHIRMER, S. Implementation of quantum gates via optimal control. Journal of Modern Optics 56, 6 (2009), 831–839. 83
- [134] SCHLEICH, W. P., RANADE, K. S., ANTON, C., ET AL. Quantum technology : from research to application. Applied Physics B 122, 5 (2016), 130. 135
- [135] SEMËNOVIČ, P. L., GRIGOREVICH, B. V., VALERIANOVICH, G. R., FROLOVICH, M. E., E., B. D., AND PONTRÂGIN, L. S. The mathematical theory of optimal processes / L. S. Pontryagin, V. G. Boltyanskii, R. V. Gamkrelidze, E.F. Mishchenko; translated by D. E. Brown. International series of monographs in pure and applied mathematics. Pergamon Press The MacMillan Comany, Oxford Paris [etc.] New York, 1964. 11
- [136] SHORE, B. W. The theory of coherent atomic excitation. Vol. 1. A Wiley-Interscience Publication. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1990. 17
- [137] SINGH, J., ZEIER, R., CALARCO, T., AND MOTZOI, F. Compensating for nonlinear distortions in controlled quantum systems. *Phys. Rev. Appl.* 19 (Jun 2023), 064067. 67
- [138] STOREY, P., AND COHEN-TANNOUDJI, C. The feynman path integral approach to atomic interferometry. a tutorial. Journal de Physique II 4, 11 (1994), 1999–2027. 48

- [139] SUSSMANN, H., AND WILLEMS, J. 300 years of optimal control : From the brachystochrone to the maximum principle. *IEEE Control Systems* 17, 3 (June 1997), 32–44. 11
- [140] TINO, G., AND KASEVICH, M. Atom Interferometry. EBL-Schweitzer. IOS Press, 2014. 48
- [141] TOROSOV, B. T., GUÉRIN, S., AND VITANOV, N. V. High-fidelity adiabatic passage by composite sequences of chirped pulses. *Phys. Rev. Lett.* 106 (Jun 2011), 233001.
 137
- [142] TOROSOV, B. T., SHORE, B. W., AND VITANOV, N. V. Coherent control techniques for two-state quantum systems : A comparative study. *Phys. Rev. A* 103 (Mar 2021), 033110. 112, 137
- [143] TORRONTEGUI, E., IBANEZ, S., MARTINEZ-GARAOT, S., MODUGNO, M., DEL CAMPO, A., GUÉRY-ODELIN, D., RUSCHHAUPT, A., CHEN, X., AND MUGA, J. Chapter 2 - Shortcuts to Adiabaticity, vol. 62 of Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics. Academic Press, 2013. 112, 137
- [144] TRÉLAT, E. Contrôle optimal : théorie & applications. Vuibert, 2005. ISBN 2 7117 7175 X. 12, 24, 27, 29
- [145] TRÉLAT, E. Optimal control and applications to aerospace : some results and challenges. Journal of Optimization Theory and Applications 154 (2012), 713–758. 29
- [146] VAN DAMME, L. Contrôle optimal de la dynamique des spins : applications en résonance magnétique nucléaire et information quantique. PhD thesis, 2016. Thèse de doctorat dirigée par Sugny, Dominique Physique Dijon 2016. 18
- [147] VAN DAMME, L., ANSEL, Q., GLASER, S. J., AND SUGNY, D. Time-optimal selective pulses of two uncoupled spin-1/2 particles. *Phys. Rev. A 98* (Oct 2018), 043421. 116
- [148] VAN LOAN, C. Computing integrals involving the matrix exponential. IEEE Transactions on Automatic Control 23, 3 (1978), 395–404. 34
- [149] VITANOV, N. V., HALFMANN, T., SHORE, B. W., AND BERGMANN, K. Laserinduced population transfer by adiabatic passage techniques. Annual Review of Physical Chemistry 52, Volume 52, 2001 (2001), 763–809. 112, 137
- [150] VITANOV, N. V., RANGELOV, A. A., SHORE, B. W., AND BERGMANN, K. Stimulated Raman adiabatic passage in physics, chemistry, and beyond. *Rev. Mod. Phys. 89* (2017), 015006. 137
- [151] WANG, Y., HU, Z., SANDERS, B. C., AND KAIS, S. Qudits and high-dimensional quantum computing. *Frontiers in Physics 8* (2020). 80
- [152] WENDIN, G. Quantum information processing with superconducting circuits : a review. Reports on Progress in Physics 80, 10 (sep 2017), 106001. 11
- [153] WHITTY, C., KIELY, A., AND RUSCHHAUPT, A. Quantum control via enhanced shortcuts to adiabaticity. *Phys. Rev. Res.* 2 (Jun 2020), 023360. 112, 137
- [154] WOLFE, P. Convergence conditions for ascent methods. ii : Some corrections. SIAM Review 13, 2 (1971), 185–188. 140
- [155] XIA, M., ZHOU, C., LIU, C., PATEL, P., CAO, X., LU, P., MESITS, B., MUCCI, M., GORSKI, D., PEKKER, D., AND HATRIDGE, M. Fast superconducting qubit control with sub-harmonic drives. arXiv :2306.10162 (2023). 74

[156] ZHANG, Z., AND ZHUANG, Q. Distributed quantum sensing. Quantum Science and Technology 6, 4 (jul 2021), 043001. 115