



HAL
open science

Simulation numérique de systèmes quantiques ouverts en grande dimension

Julien Roussel

► **To cite this version:**

Julien Roussel. Simulation numérique de systèmes quantiques ouverts en grande dimension. Analyse numérique [math.NA]. 2015. hal-01205747

HAL Id: hal-01205747

<https://inria.hal.science/hal-01205747>

Submitted on 27 Sep 2015

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.



2015
Thèse de Master
Spécialité Mathématiques de la Modélisation
Julien ROUSSEL

Simulation numérique de systèmes quantiques ouverts en grande dimension

Stage réalisé au sein du Cermics et du CAS

du 1er mars au 31 juin 2015

Maîtres de stage : Claude LE BRIS et Pierre ROUCHON

Remerciements

Je tiens à remercier Claude et Pierre qui ont su m'orienter et me donner des idées fructueuses. C'est d'eux que viennent les idées originelles du rang réduit adaptatif et de la réduction de variance exposés ici, et leurs grands savoir-faire ont porté ce travail du début à la fin. Merci pour tout le temps et l'attention que cela leur a demandé pour mener à bien ce projet. Grâce à Claude j'ai également eu l'opportunité de partir en conférence à Oberwolfach, et de rencontrer des grands chercheurs du monde quantique. Enfin ma gratitude va à mes collègues, au CAS comme au Cermics, qui ont égaillé les pauses repas et fait de ce stage une excellente expérience.

Résumé

Résoudre exactement l'équation de Lindblad, qui modélise l'évolution des systèmes quantiques ouverts, n'est possible que pour des tailles petites. C'est pourquoi on souhaite disposer d'une gamme de méthodes permettant de calculer des solutions approchées. On présentera une méthode déterministe dite de rang réduit, qui repose sur une forme réduite approchée de la matrice densité, puis une méthode stochastique de Monte-Carlo qui donne la solution à une erreur statistique près. On exposera d'une part une extension de la méthode de rang réduit qui permet d'utiliser un rang adaptatif en majorant l'erreur commise, et d'autre part une nouvelle méthode de réduction de variance. Cette nouvelle méthode permet d'accélérer considérablement les simulations de Monte-Carlo en utilisant la solution approchée fournie par la méthode rang réduit comme variable de contrôle.

Abstract

Solving exactly the Lindblad equations, that model the evolution of open quantum systems, is only possible for small sizes. This is why we wish to have a range of methods enabling us to compute approximate solutions. We present a deterministic low-rank method that is based upon a reduced approximate form of the density matrix, then a stochastic method of Monte-Carlo that gives the solution up to a statistical noise. We will first introduce an extension of the low-rank method, allowing us to use an adaptive rank while enforcing an upper bound on the error, and then a new variance reduction method. This new method speeds a lot the Monte-Carlo simulations by using the approximate solution given by the low-rank method as a control variate.

Table des matières

1	Méthode de rang réduit	6
1.1	Motivation	6
1.2	Décomposition rang réduit et dynamique projetée	6
1.3	Intégration numérique	8
1.4	Tests numériques	9
1.5	Augmentation optimale du rang	10
1.5.1	Calcul du minimiseur	10
1.5.2	Aspect numérique	12
1.5.3	Erreur en temps long	12
1.5.4	Tests numériques	13
2	Méthodes de Monte-Carlo	15
2.1	Processus de Poisson	15
2.1.1	Description	15
2.1.2	Schéma numérique	16
2.2	Processus de Wiener	16
2.2.1	Processus naïf	16
2.2.2	Processus corrigé	17
2.3	Analyse de la variance	19
3	Réduction de variance	20
3.1	Choix de l'EDS pour le Monte-Carlo Rang Réduit	20
3.1.1	EDS 1	21
3.1.2	EDS 2	21
3.1.3	EDS 3	21
3.2	Résultats numériques	23
A	Calculs d'Itô	27
A.1	Processus de Poisson	27
A.2	Processus de Wiener	28
A.3	Processus de Wiener rang réduit	29

Introduction

L'équation de Lindblad est une équation d'évolution permettant de décrire les systèmes quantiques ouverts. La dynamique de tels systèmes est caractérisée d'une part par les interactions entre les particules qui le constituent, et d'autre part par les interactions avec l'environnement. L'évolution interne est de type Hamiltonienne, et elle fait intervenir des lois de conservation. L'interaction avec l'environnement correspond à des mesures non lues sur le système, c'est-à-dire à une perte d'information, qui est appelée décohérence. Cela signifie que même si le système est dans un état connu à l'instant initial, son état à un moment ultérieur ne sera connu que *via* une mesure de probabilité définie par la matrice densité ρ . La densité associée à la probabilité d'observer le système dans l'état ψ est par définition $\psi^\dagger \rho \psi$ et ainsi le fait qu'une mesure de probabilité soit une mesure positive normalisée implique que la matrice densité ρ est positive de trace 1.

Notant H l'opérateur Hamiltonien (hermitien) représentant l'évolution interne du système et L l'opérateur de décohérence représentant l'interaction du système avec son environnement, l'équation de Lindblad du système s'écrit :

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H, \rho] - \frac{1}{2}(L^\dagger L \rho + \rho L^\dagger L) + L \rho L^\dagger. \quad (1)$$

Pour effectuer une simulation numérique, on utilise une méthode de Galerkin qui consiste à décrire le système à l'aide d'états ψ de dimension finie n . Ainsi les opérateurs H et L sont des matrices de taille n . En pratique la difficulté réside dans le fait que la dimension n peut être très grande, de l'ordre de 15000 par exemple, ce qui rend impossible toute intégration exacte.

C'est pourquoi il s'agira dans ce rapport d'étudier deux familles de méthodes de simulation approchée. On présentera d'abord une méthode déterministe basée sur une approximation de rang réduit, puis des méthodes stochastiques de Monte-Carlo. Deux nouveaux développements sont proposés dans le présent rapport. Le premier consiste à utiliser un rang adaptatif dans la méthode de rang réduit. En effet cette méthode repose sur l'hypothèse que la matrice densité est de rang inférieur à un paramètre m fixe, qui est difficile à régler a priori. On verra qu'il est possible de fixer un seuil d'erreur et d'ajuster le paramètre m automatiquement au fil de la simulation, ce qui permettra de gagner en temps de calcul et en résilience. Le second apport est une technique permettant d'utiliser la méthode de rang réduit pour réduire la variance d'une simulation Monte-Carlo en s'en servant comme variable de contrôle.

Ainsi on disposera de quatre méthodes de simulation permettant de s'adapter au régime dans lequel on se trouve. Dans le cas où le système est de petite taille alors on peut l'intégrer de façon exacte. Sinon si les hypothèses de l'approximation de rang réduit sont vérifiées alors on applique cette méthode car elle évite d'introduire un bruit statistique, contrairement aux méthodes stochastiques. Si ces hypothèses sont partiellement vraies alors on couplera les approches déterministe et stochastique, la simulation de Monte-Carlo agissant alors comme une correction. Et enfin si l'approximation n'est pas du tout vérifiée il sera nécessaire de recourir à une méthode de Monte-Carlo standard, qui est très coûteuse.

Cas test : ré-excitation oscillatoire

Les systèmes quantiques ouverts sont typiquement composés d'atomes et de photons piégés dans une cavité aux parois formées de miroirs quasi-parfaits [6]. Dans ce qui suit on se concentrera sur la résolution du problème particulier introduit dans l'article [3] qui est représentatif des difficultés inhérentes à l'équation de Lindblad. On considère N_a atomes en interaction résonnante avec un champ quantique mono-mode dans une cavité presque-parfaite (voir Fig. 1). Dans ce cas la méthode de Galerkin employée consiste à représenter les états photoniques au moyen d'une base de $N_p + 1$ états de Fock $|k\rangle_{k=0,\dots,N_p}$ et les états atomiques par $N_a + 1$ états de Dicke $|\mu\rangle_{\mu=0,\dots,N_a}$.

L'opérateur de décohérence représente alors l'imperfection des miroirs qui provoque la disparition progressive des photons. Il s'écrit $L = \sqrt{\kappa}a$ où κ est l'inverse du temps de vie moyen d'un photon et a est l'opérateur d'annihilation :

$$a|k\rangle = \sqrt{k}|k-1\rangle.$$

Le Hamiltonien modélise une interaction résonnante entre atomes et photons, qui prend la forme $H = i\frac{\Omega_0}{2}(a^\dagger J^- - aJ^+)$ où Ω_0 est la force du couplage et où J^- est l'opérateur de désexcitation atomique :

$$J^-|\mu\rangle = \sqrt{\mu(N_a + 1 - \mu)}|\mu - 1\rangle$$

et $J^+ = (J^-)^\dagger$.

On part de l'état initial ψ_0 où les atomes sont dans l'état excité $|N_a\rangle$ et où les photons sont dans un état cohérent à \bar{n} photons. Le système est alors connu exactement donc la matrice densité charge l'état ψ_0 avec la probabilité 1. On note ψ_0 à l'aide d'un produit tensoriel de la façon suivante :

$$\psi_0 = |N_a\rangle \otimes e^{-\frac{\bar{n}}{2}} \sum_{k=0}^{N_p} \frac{\sqrt{\bar{n}^k}}{\sqrt{k!}} |k\rangle \in \mathbb{R}^n = \mathbb{R}^{(N_p+1) \times (N_a+1)}, \quad (2)$$

$$\rho(t=0) = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|.$$

On s'intéresse à la population d'atomes excités, *ie.* dans l'état $\mu = N_a$, qui vaut 1 = 100% à l'instant initial et qui connaît une ré-excitation (ou *revival* voir Fig. 2) au temps adimensionné $\phi \equiv \frac{\Omega_0 t}{2\sqrt{\bar{n}}} = 2\pi$. L'opérateur $L = \sqrt{\kappa}a$ dissipant l'énergie, le système converge ensuite vers l'état $|0,0\rangle$ où tous les photons ont disparu et où les atomes sont au minimum d'énergie. La grande qualité des miroirs qui permettent de confiner le système se traduit par un grand temps de vie des photons devant l'échelle de temps qui caractérise les interactions entre photons et atomes : $\kappa \ll \Omega_0$. Ainsi le phénomène de décohérence est faible, donc la dissipation associée est lente.

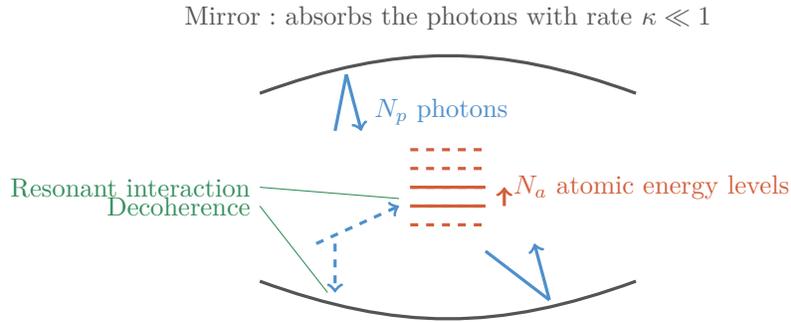


FIGURE 1 – Atomes et photons en interaction résonnante dans une cavité aux parois quasi-parfaitement réfléchissantes

Dans tout ce qui suit, ainsi que pour la figure 2, notre cas test est la simulation de $N_a = 1$ atome interagissant avec $\bar{n} = 15$ photons ($N_p = 30$ états de Fock), et fera donc intervenir des matrices de taille 62×62 . Cette petite instance permet de valider les méthodes proposées, en particulier car elle permet de comparer les résultats à la solution exacte. Nous avons également montré que les méthodes considérées étaient applicable à un grand système ($N_a = 50$ et $N_p = 300$), qui est impossible à simuler de façon exacte. Enfin on a fixé $\kappa = \frac{\Omega_0}{500}$, ce qui correspond à une faible décohérence.

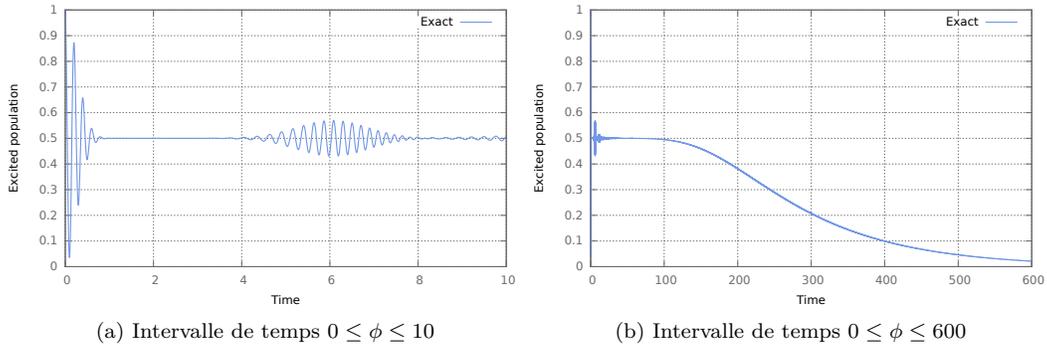


FIGURE 2 – Évolution de la population d'états excités

1 Méthode de rang réduit

1.1 Motivation

De même que dans les expériences usuelles, nous supposons que l'état du système à l'instant initial est pur (2). Cela signifie que l'on connaît parfaitement l'état du système au début. Inversement si la matrice densité se diagonalise comme :

$$\rho = \sum_{i=1}^m a_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|,$$

alors cela signifie que le système s'écrit comme la superposition des m états orthogonaux ψ_i , et la probabilité d'observer ψ_i est a_i . Mathématiquement cela correspond au fait que la matrice densité est de rang m , ce qui permet finalement de dire que la pureté du système est caractérisée par le rang de la matrice densité.

Si la matrice restait de rang 1 il suffirait de simuler l'évolution déterministe de son unique vecteur propre, ce qui serait rapide car cela ne fait pas intervenir de produits entre grandes matrices. Cependant les interactions du système avec son environnement tendent, dans un premier temps, à augmenter le rang de ρ . En effet, partant d'un état pur $\rho(t=0) = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$, la matrice densité à $t = \Delta t$ sera d'après l'équation maîtresse (1) :

$$\rho(\Delta t) \approx |\psi(\Delta t)\rangle\langle\psi(\Delta t)| + \kappa\Delta t |a\psi_0\rangle\langle a\psi_0|$$

où

$$\psi(\Delta t) = \left(\mathbb{I}_n - iH\Delta t - \frac{1}{2}L^\dagger L\Delta t \right) \psi_0.$$

Le second terme implique que la matrice ρ ne reste pas de rang 1, et qu'un nouvel état $|a\psi_0\rangle$ apparaît. Cependant il existe un régime transitoire d'une durée typique $t^* = \frac{1}{\kappa n}$ (soit $\phi^* = \frac{\Omega_0\pi}{\kappa\sqrt{n}}$) durant lequel la matrice ρ reste de rang petit.

On peut voir Fig. 3 que l'on part d'un état pur correspondant à la première valeur propre, qui vaut donc 1. On observe initialement un régime transitoire ($\phi \leq 30$) au cours duquel seul un petit nombre de valeurs propres sont non négligeables, et donc où la matrice densité est bien approximée par une matrice de rang faible. Cependant cette propriété n'est plus vraie par la suite car alors un grand nombre de valeurs propres ne sont pas petites ($30 \leq \phi \leq 150$), et donc où les états quantiques sont mélangés. Enfin dans un dernier temps le rang de ρ se remet à diminuer lorsque le système converge vers l'état fondamental. Les états initial et final du système sont donc purs, mais ce dernier passe par un état transitoire mélangé.

On présente dans ce qui suit la méthode de rang réduit introduite dans l'article [3]. L'idée de cette méthode est de choisir un rang maximal m et de projeter à chaque pas de temps la matrice densité ρ sur la variété \mathcal{D}_m des matrices symétriques positives de rang au plus m et de trace 1.

1.2 Décomposition rang réduit et dynamique projetée

On remarque que si l'on suppose que ρ appartient à la variété \mathcal{D}_m des matrices symétriques positives de rang au plus m alors elle peut s'écrire de façon réduite comme une petite matrice symétrique positive σ de

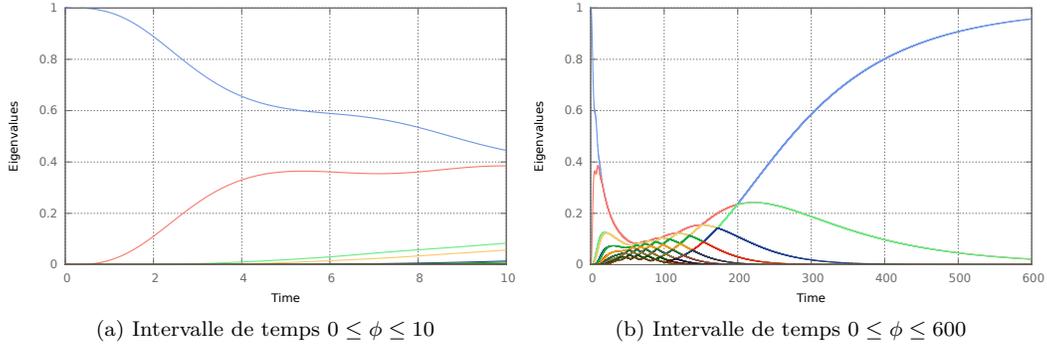


FIGURE 3 – Évolution des plus grandes valeurs propres de la matrice densité ρ

trace 1 et de taille m , conjuguée par une matrice unitaire U :

$$\begin{aligned} \text{Si } \rho \in \mathcal{D}_m = \{A \in S_n^+ \mid \text{rg}(A) \leq m, \text{Tr } A = 1\} \\ \text{alors } \exists \begin{cases} U \in \mathbb{R}^{n \times m}, U^\dagger U = \mathbb{I}_m \\ \sigma \in S_m^+, \text{Tr } \sigma = 1 \end{cases} \text{ tq. } \rho = U\sigma U^\dagger. \end{aligned}$$

Il est important de noter que si le rang m de la matrice est très petit devant sa taille n alors cette nouvelle forme est beaucoup plus compacte.

$$n \begin{array}{c} \overleftarrow{n} \\ \left(\begin{array}{c} \rho \end{array} \right) \\ \downarrow \end{array} = n \begin{array}{c} \overleftarrow{m} \\ \left(\begin{array}{c} U \end{array} \right) \\ \downarrow \end{array} \times_m \begin{array}{c} \overleftarrow{m} \\ \left(\begin{array}{c} \sigma \end{array} \right) \\ \downarrow \end{array} \times_m \begin{array}{c} \overleftarrow{n} \\ \left(\begin{array}{c} U^\dagger \end{array} \right) \\ \downarrow \end{array} \quad (3)$$

Il s'agit à présent de trouver une dynamique sur les éléments réduits U et σ permettant d'approcher au mieux la dynamique de Lindblad que l'on notera de façon abrégée :

$$\frac{d}{dt}\rho = \mathcal{L}(\rho) \equiv -i[H, \rho] - \frac{1}{2}(L^\dagger L \rho + \rho L^\dagger L) + L \rho L^\dagger.$$

On présente ici les grandes étapes du calcul qui a été fait dans [3], et qui consiste à projeter $\mathcal{L}(\rho)$ sur l'espace tangent $T_\rho \mathcal{D}_m$ à \mathcal{D}_m en ρ afin de définir une dynamique approchée sur \mathcal{D}_m (voir Fig. 4). On note $\mathcal{L}^\parallel(\rho) \in T_\rho \mathcal{D}_m$ la composante projetée sur l'espace tangent et $\mathcal{L}^\perp(\rho) = \mathcal{L}(\rho) - \mathcal{L}^\parallel(\rho) \in (T_\rho \mathcal{D}_m)^\perp$ l'erreur de projection.

Pour projeter on utilise le produit scalaire engendré par la norme de Frobenius, donc il s'agit de résoudre le problème de minimisation :

$$\mathcal{L}^\parallel(\rho) \equiv \arg \min_{\xi \in T_\rho \mathcal{D}_m} \|\mathcal{L}(\rho) - \xi\| \quad (4)$$

Afin de résoudre ce problème, on parcourt l'espace tangent au moyen de $\eta \in S_n$ et de $\varsigma \in S_m$ à trace nulle :

$$\xi = i[\eta, \rho] + U\varsigma U^\dagger \in T_\rho \mathcal{D}_m.$$

Après résolution du nouveau problème de minimisation sous contrainte obtenu, exprimé avec ces deux nouvelles variables, on obtient en prenant $\frac{d}{dt}U = i\eta U$ et $\frac{d}{dt}\sigma = \varsigma$:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}U &= -iHU + (\mathbb{I}_n - P) \left(-\frac{1}{2}L^\dagger L + LU\sigma U^\dagger L^\dagger U\sigma^{-1}U^\dagger\right)U, \\ \frac{d}{dt}\sigma &= -\frac{1}{2}(U^\dagger L^\dagger LU\sigma + \sigma U^\dagger L^\dagger LU) + U^\dagger LU\sigma U^\dagger L^\dagger U + \frac{1}{m} \text{Tr}(L^\dagger(\mathbb{I}_n - P)LU\sigma U^\dagger)\mathbb{I}_m, \end{cases} \quad (5)$$

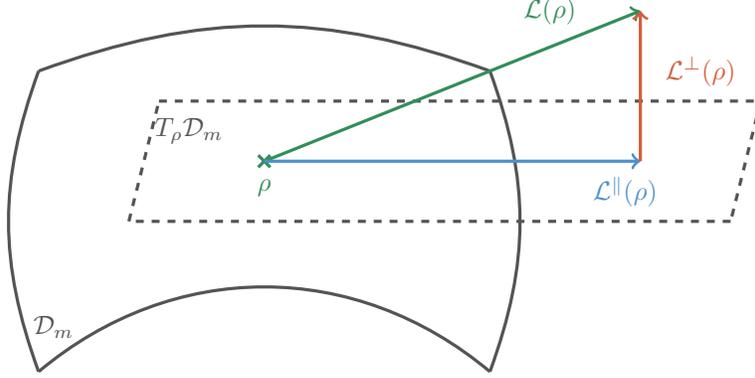


FIGURE 4 – Dynamique projetée

où $P = UU^\dagger$ est le projecteur (de rang m) sur l'image de U , qui dépend donc de ρ . Cette équation d'évolution définit une dynamique réduite sur la matrice densité approchée $\rho = U\sigma U^\dagger$, qui est celle utilisée en pratique.

On peut calculer l'équation qui est alors vérifiée par la solution approchée. En dérivant simplement $\rho = U\sigma U^\dagger$, on obtient :

$$\frac{d}{dt}\rho = \mathcal{L}^\parallel(\rho) = -i[H, \rho] - \frac{1}{2} (L^\dagger L \rho + \rho L^\dagger L) + L \rho L^\dagger - (\mathbb{I}_n - P) L \rho L^\dagger (\mathbb{I}_n - P) + \frac{\text{Tr}(L \rho L^\dagger (\mathbb{I}_n - P))}{m} P \quad (6)$$

et donc à une erreur de projection :

$$\mathcal{L}^\perp(\rho) = (\mathbb{I}_n - P) L \rho L^\dagger (\mathbb{I}_n - P) - \frac{\text{Tr}(L \rho L^\dagger (\mathbb{I}_n - P))}{m} P. \quad (7)$$

On notera que grâce à un choix de jauge au moment de la détermination des matrices η et ς le Hamiltonien H n'intervient pas directement dans la dynamique de la matrice σ . Ainsi, puisque $\kappa \ll \Omega_0$, H domine L donc on s'attend à ce que l'évolution de σ soit lente par rapport à l'évolution de U . On utilise cette bonne propriété à travers un schéma numérique adapté à ce découplage des échelles de temps, qui fait l'objet de la section suivante.

1.3 Intégration numérique

On présente l'intégrateur introduit dans l'article initial [3]. On note U_k, σ_k l'approximation numérique de la solution $U(k\Delta t), \sigma(k\Delta t)$ du système (5) au temps $k\Delta t$, où k est un entier et Δt est le pas de temps choisi. Le schéma employé consiste en un schéma de Trotter, qui se décompose donc en trois étapes :

- On intègre la dynamique Hamiltonienne sur U de façon précise sur un demi-pas de temps :

$$U_{k+1/3} = \left(\mathbb{I}_n - \frac{i\Delta t}{2} H - \frac{\Delta t^2}{8} H^2 + \frac{i\Delta t^3}{48} H^3 \right) U_k \quad (8)$$

- On intègre simultanément la partie non-Hamiltonienne de la dynamique pour U et σ avec un schéma conservant la symétrie de σ , puis on renormalise σ afin d'assurer exactement la conservation de sa trace à 1. Pour cela on prend dans un premier temps en compte les termes en L dans l'évolution de U :

$$U_{k+2/3} = U_{k+1/3} + \Delta t \left(\mathbb{I}_n - U_{k+1/3} U_{k+1/3}^\dagger \right) \left(-\frac{1}{2} L^\dagger L U_{k+1/3} + L U_{k+1/3} \sigma_k U_{k+1/3}^\dagger L^\dagger U_{k+1/3} \sigma_k^{-1} \right) \quad (9)$$

puis on actualise σ_k en deux temps :

$$\begin{aligned} \sigma_{k+1/2} &= \sigma_k + \Delta t U_{k+1/3}^\dagger L U_{k+1/3} \sigma_k U_{k+1/3}^\dagger L^\dagger U_{k+1/3} \\ &+ \frac{\Delta t}{m} \text{Tr} \left(\left(U_{k+1/3}^\dagger L^\dagger L U_{k+1/3} - U_{k+1/3}^\dagger L^\dagger U_{k+1/3} U_{k+1/3}^\dagger L U_{k+1/3} \right) \sigma_k \right) \mathbb{I}_m \end{aligned} \quad (10)$$

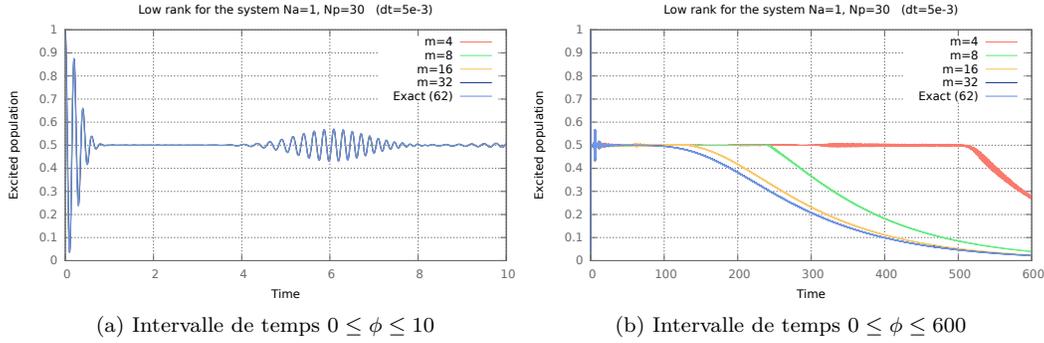


FIGURE 5 – Représentation de la population d'états excités en fonction du temps pour la méthode rang-réduit avec différents rangs m

suivi de :

$$\sigma_{k+1} = \frac{\left(\mathbb{I}_m - \frac{\Delta t}{2} U_{k+1/3}^\dagger L^\dagger L U_{k+1/3} \right) \sigma_{k+1/2} \left(\mathbb{I}_m - \frac{\Delta t}{2} U_{k+1/3}^\dagger L^\dagger L U_{k+1/3} \right)}{\text{Tr} \left(\left(\mathbb{I}_m - \frac{\Delta t}{2} U_{k+1/3}^\dagger L^\dagger L U_{k+1/3} \right) \sigma_{k+1/2} \left(\mathbb{I}_m - \frac{\Delta t}{2} U_{k+1/3}^\dagger L^\dagger L U_{k+1/3} \right) \right)} \quad (11)$$

- On intègre la dynamique Hamiltonienne sur U de façon précise sur un demi-pas de temps, puis on l'orthonormalise pour assurer exactement $U_{k+1}^\dagger U_{k+1} = \mathbb{I}_m$:

$$U_{k+1} = \Upsilon \left(\left(\mathbb{I}_m - \frac{i \Delta t}{2} H - \frac{\Delta t^2}{8} H^2 + \frac{i \Delta t^3}{48} H^3 \right) U_{k+2/3} \right) \quad (12)$$

où Υ symbolise cette orthonormalisation.

Complexité La matrice de décoherence L et les puissances du Hamiltonien H contiennent $\mathcal{O}(n)$ coefficients non nuls donc les produits du type $L^\dagger \times L$ ont une complexité $\mathcal{O}(n)$. De plus les produits du type $H^p U$ ou LU ont une complexité $n \times m$, et les produits du type $U^\dagger U$ ont une complexité $n \times m^2$. Ainsi la complexité de l'algorithme de rang réduit est :

$$C_{\text{LR}} = \mathcal{O}(n \times m^2),$$

à comparer avec la complexité $C_{\text{ex}} = \mathcal{O}(n^2)$ d'un schéma d'intégration exacte standard. Qualitativement, cette méthode est donc intéressante si le rang effectif m de ρ vérifie $m^2 \leq n$.

1.4 Tests numériques

On représente figure 5 le comportement qualitatif de la population excitée pour la méthode rang-réduit. On observe qu'un rang très petit suffit à bien capter la dynamique pour des temps réduits ($\phi \leq 10$). Cependant, comme l'analyse des valeurs propres de la matrice densité l'avait laissé prévoir (voir Fig. 3), la méthode n'est pas satisfaisante pour des temps plus long pour des rangs m raisonnables. En effet les hypothèses de rang réduit sont fausses dans un régime transitoire ($30 \leq \phi \leq 150$) donc la méthode n'est plus valable. Sur la figure 6 on trace l'erreur angulaire de projection définie par :

$$\theta_{\text{err}}(\rho) \equiv \frac{\|\mathcal{L}^\perp(\rho)\|}{\|\mathcal{L}^\parallel(\rho)\|}.$$

Il apparaît que pour des rangs raisonnables cet angle n'est pas petit lorsque les états sont mélangés ($\phi \approx 50$). Ceci explique que le comportement en temps long n'est pas bien approché. On souhaiterait être capable d'augmenter le paramètre m dans ce régime où la matrice densité est de rang grand, afin de contrôler l'erreur de projection. L'introduction de ce rang adaptatif est l'objet de ce qui suit.

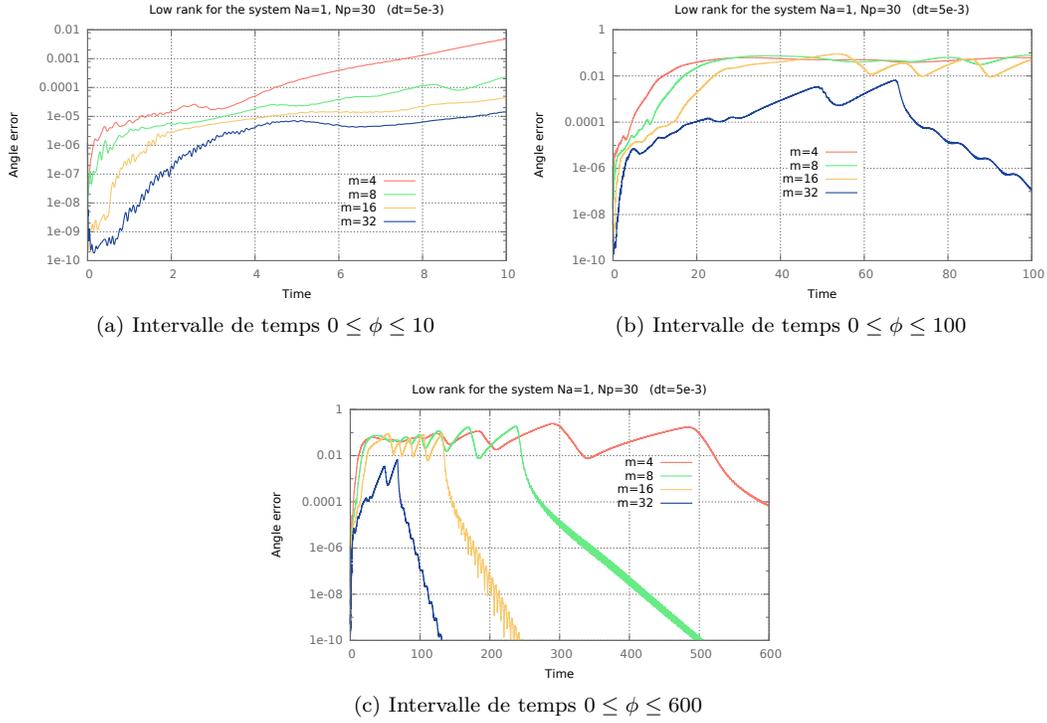


FIGURE 6 – Représentation de l’erreur de projection angulaire en fonction du temps pour la méthode rang-réduit avec différents rangs m

1.5 Augmentation optimale du rang

1.5.1 Calcul du minimiseur

On a vu précédemment en (7) que l’erreur de projection est :

$$\mathcal{L}^\perp(\rho) = (\mathbb{I}_n - P)L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P) - \frac{\text{Tr}(L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P))}{m}P.$$

Cette erreur peut être diminuée en ajoutant une colonne à la matrice U , c’est-à-dire en ajoutant une direction au sous-espace $\text{Im}(U)$ associé au projecteur P . Il s’agit de trouver la meilleure direction $V \in (\text{Im}(U))^\perp$ à ajouter au sens où l’erreur de projection est minimale. On ajoute simultanément à la matrice σ une ligne et une colonne nulles afin d’obtenir un élément de $\mathbb{R}^{(m+1) \times (m+1)}$, ainsi la matrice densité ρ n’est pas modifiée car on ne charge pas artificiellement la nouvelle direction V .

Si l’on ajoute une direction $V \in \mathbb{R}^n$ à U alors le projecteur $P = UU^\dagger \in \mathbb{R}^{n \times n}$ de rang m devient $P + Q = UU^\dagger + VV^\dagger \in \mathbb{R}^{n \times n}$ de rang $m + 1$, où $Q = VV^\dagger$ est le projecteur de rang 1 associé à la nouvelle direction. Notant $G \equiv (\mathbb{I}_n - P)L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P)$, l’erreur de projection commise après ajout de la direction V est :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{P+Q}^\perp(\rho) &= (\mathbb{I}_n - (P + Q))L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - (P + Q)) - \frac{\text{Tr}(L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - (P + Q)))}{m + 1}(P + Q) \\ &= (\mathbb{I}_n - Q)G(\mathbb{I}_n - Q) - \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - Q)G)}{m + 1}(P + Q) \\ \|\mathcal{L}_{P+Q}^\perp(\rho)\|^2 &= \|(\mathbb{I}_n - Q)G(\mathbb{I}_n - Q)\|^2 + \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - Q)G)^2}{m + 1} \end{aligned}$$

où on a utilisé $(\mathbb{I}_n - P)(\mathbb{I}_n - Q) = \mathbb{I}_n - P - Q + PQ = \mathbb{I}_n - P - Q$ et $\|P + Q\|^2 = m + 1$ car les projecteurs P et Q sont orthogonaux. On peut caractériser les directions V minimisant cette erreur grâce à la proposition suivante.

Proposition Les directions $V \in \mathbb{R}^n$ minimisant l'erreur de projection :

$$V = \arg \min_{\substack{V \perp U \\ \|V\|=1}} \|\mathcal{L}_{P+Q}^\perp(\rho)\|$$

sont exactement les valeurs propres de G associées à sa plus grande valeur propre.

Si la plus grande valeur propre de G est simple alors le minimiseur V est unique au signe près.

Remarques L'erreur est composée de deux termes : le premier est dû à la projection sur l'espace tangent à la variété des matrices de rang faible et le second est dû à la projection sur l'espace des matrices à trace 1. Minimiser l'erreur de projection totale est en fait équivalent à minimiser le premier terme, ce qui indique que la contrainte de trace égale à 1 ne perturbe pas la dynamique de ce point de vue. On notera également que la matrice G est symétrique positive et que ses valeurs propres sont donc réelles positives.

Preuve On développe l'expression à minimiser, en utilisant les relations sur les projecteurs telles que $PQ = 0$, $P(\mathbb{I}_n - P) = 0$, $(\mathbb{I}_n - P)(\mathbb{I}_n - P) = (\mathbb{I}_n - P)$:

$$\begin{aligned} \|\mathcal{L}_{P+Q}^\perp(\rho)\|^2 &= \text{Tr}((1-Q)G(1-Q)G) + \frac{\text{Tr}((1-Q)G)^2}{m+1} \\ &= \|G\|^2 - 2\text{Tr}(QG^2) + \text{Tr}(QGQG) + \frac{\text{Tr}(G)^2 - 2\text{Tr}(G)\text{Tr}(QG) + \text{Tr}(QG)^2}{m+1}. \end{aligned}$$

On remarque que :

$$\text{Tr}(QGQG) = \text{Tr}(V \underbrace{(V^\dagger G V)}_{\in \mathbb{R}} V^\dagger G) = (V^\dagger G V)^2 = \text{Tr}(QG)^2$$

et on en déduit :

$$\|\mathcal{L}_{P+Q}^\perp(\rho)\|^2 = \|G\|^2 - 2\text{Tr}(QG^2) + \frac{m+2}{m+1}\text{Tr}(QG)^2 - \frac{2\text{Tr}(G)}{m+1}\text{Tr}(QG) + \frac{1}{m+1}\text{Tr}(G)^2.$$

Retirant les deux termes indépendants de Q , on peut réécrire le problème comme la minimisation de :

$$J_P(Q) \equiv -2\text{Tr}(QG^2) + \frac{m+2}{m+1}\text{Tr}(QG)^2 - \frac{2\text{Tr}(G)}{m+1}\text{Tr}(QG).$$

On orthodiagonalise la matrice symétrique G :

$$G \rightarrow \begin{pmatrix} g_1 & & (0) \\ & \ddots & \\ (0) & & g_n \end{pmatrix} \text{ et } Q \rightarrow \begin{pmatrix} q_1 & & (\star) \\ & \ddots & \\ (\star) & & q_n \end{pmatrix}$$

où les $g_i \geq 0$ sont les valeurs propres de G classées par ordre décroissant. Cherchons les conditions sur les coefficients diagonaux q_i de Q .

$$J_P(Q) = -2 \sum_j q_j g_j^2 + \frac{m+2}{m+1} \left(\sum_j g_j q_j \right)^2 - \frac{2}{m+1} \left(\sum_j g_j \right) \left(\sum_j g_j q_j \right)$$

On cherche à minimiser ce polynôme de degré 2 sous la contrainte $\forall i, q_i \geq 0$ et $\sum_i q_i = 1$. On a donc $q_1 = 1 - \sum_{j=2}^n q_j$ où $\sum_{i=2}^n q_i \leq 1$, ce qui donne :

$$\begin{aligned} J_P(Q) &= -2g_1^2 + 2 \sum_{j=2}^n q_j (g_1^2 - g_j^2) + \frac{m+2}{m+1} \left(g_1 - \sum_{j=2}^n q_j (g_1 - g_j) \right)^2 - \frac{2}{m+1} \left(\sum_{i=1}^n g_i \right) \left(g_1 - \sum_{j=2}^n q_j (g_1 - g_j) \right) \\ &= C + \sum_{j=2}^n \left(2(g_1 + g_j) - 2\frac{m+2}{m+1}g_1 + \frac{2}{m+1} \left(\sum_{i=1}^n g_i \right) \right) (g_1 - g_j)q_j + \frac{m+2}{m+1} \left(\sum_{j=2}^n q_j (g_1 - g_j) \right)^2 \end{aligned}$$

où $C = -2g_1^2 + \frac{m+2}{m+1}g_1^2 - \frac{2}{m+1}(\sum_{i=1}^n g_i)g_1$. Or pour tout $j \in [2, n]$ on a :

$$\begin{aligned} 2(g_1 + g_j) - 2\frac{m+2}{m+1}g_1 + \frac{2}{m+1}\left(\sum_{i=1}^n g_i\right) &= 2g_j - \frac{2}{m+1}g_1 + \frac{2}{m+1}\left(\sum_{i=1}^n g_i\right) \\ &= 2g_j + \frac{2}{m+1}\left(\sum_{i=2}^n g_i\right) \geq 0 \end{aligned}$$

Donc, si on suppose que la première valeur propre g_1 est simple ($\forall j \geq 2, g_1 - g_j > 0$), alors $J_P(Q)$ décroît selon tous les q_j pour $j \geq 2$. Ainsi l'unique minimum sur le simplexe correspond à $q_1 = 1$ et $\forall j \geq 2, q_j = 0$. Notant \tilde{V} la direction recherchée dans la base diagonalisant G , $\forall j, q_j = |\tilde{V}_j|^2$, donc V est le vecteur propre de G correspondant à la plus grande valeur propre g_1 . Le problème est donc équivalent à la maximisation de $\text{Tr}(QG) = V^\dagger G V$. Dans le cas où la plus grande valeur propre g_1 est multiple alors tout vecteur du sous-espace propre associé est un maximiseur.

1.5.2 Aspect numérique

En pratique il est impossible de diagonaliser G qui est de taille n grande. Pour trouver le maximiseur V on remarque que, supposant σ diagonalisé et notant u_j les vecteurs colonnes de U :

$$V^\dagger G V = V^\dagger (\mathbb{I}_n - P) L U \sigma U^\dagger L^\dagger (\mathbb{I}_n - P) V = \|V^\dagger (\mathbb{I}_n - P) L U \sqrt{\sigma}\|^2 = \sum_{j=1}^m \sigma_i \langle V, (\mathbb{I}_n - P) L u_j \rangle^2$$

donc le maximiseur V s'écrit comme une combinaison linéaire des vecteurs $(\mathbb{I}_n - P) L u_j$. Soit $\Phi = (\phi_j)_{0 \leq j < r}$ une base orthonormale de $\text{span}(((\mathbb{I}_n - P) L u_j)_{0 \leq j < m})$ où $r = \text{rg}((\mathbb{I}_n - P) L U) \leq m$. Écrivant $V = \Phi v$ où $v \in \mathbb{R}^r$, on a donc $\|V\| = \|v\|$ et :

$$V^\dagger G V = v^\dagger \Phi G \Phi^\dagger v$$

donc le maximiseur $V = \Phi v$ correspond à v qui est le vecteur propre associé à la plus grande valeur propre de la matrice :

$$K = \Phi (\mathbb{I}_n - P) L U \sigma U^\dagger L^\dagger (\mathbb{I}_n - P) \Phi^\dagger \quad (13)$$

qui est de taille petite r .

1.5.3 Erreur en temps long

On souhaite étudier comment se propagent les erreurs de projection commises et prouver une majoration de la distance entre la solution rang faible et la solution exacte. Pour cela on note :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{\text{ex}} &= \mathcal{L}(\rho_{\text{ex}}) \quad \text{l'équation de Lindblad} \\ \frac{d}{dt} \rho_{\text{LR}} &= \mathcal{L}^\parallel(\rho_{\text{LR}}) \quad \text{l'équation de Lindblad rang faible} \\ \rho_{\text{err}}(t) &= \rho_{\text{ex}}(t) - \rho_{\text{LR}}(t) \quad \text{l'erreur commise au temps } t \end{aligned}$$

et on suppose que le rang est ajusté de façon à garantir une erreur absolue sur la dérivée le long de la dynamique rang réduit calculée :

$$\|\mathcal{L}^\perp(\rho_{\text{LR}})\| \equiv \|\mathcal{L}(\rho_{\text{LR}}) - \mathcal{L}^\parallel(\rho_{\text{LR}})\| \leq \epsilon$$

Ainsi l'erreur suit l'évolution :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{\text{err}} &= \frac{d}{dt} \rho_{\text{ex}} - \frac{d}{dt} \rho_{\text{LR}} \\ &= \mathcal{L}(\rho_{\text{ex}}) - \mathcal{L}^\parallel(\rho_{\text{LR}}) \\ &= \mathcal{L}(\rho_{\text{ex}} - \rho_{\text{LR}}) + \mathcal{L}(\rho_{\text{LR}}) - \mathcal{L}^\parallel(\rho_{\text{LR}}) \\ &= \mathcal{L}(\rho_{\text{err}}) + \mathcal{L}^\perp(\rho_{\text{LR}}) \end{aligned}$$

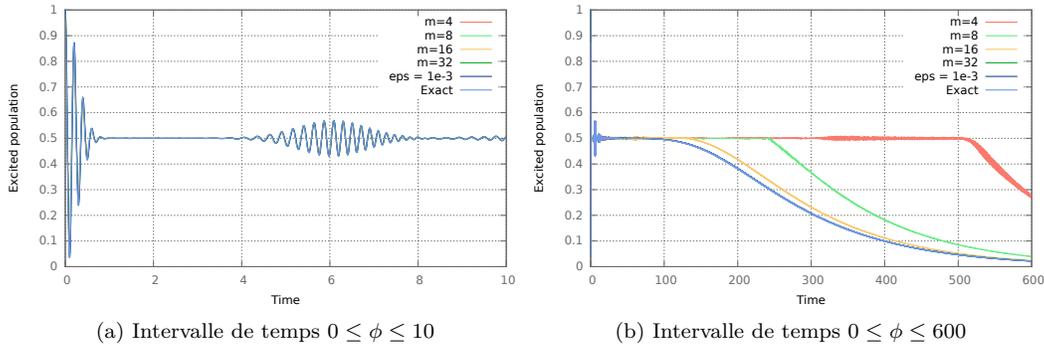


FIGURE 7 – Représentation de la population d'états excités en fonction du temps pour la méthode rang-réduit avec différents rangs m

par linéarité de l'équation de Lindblad. L'erreur ρ_{err} suit donc l'équation de Lindblad à un terme perturbatif près. Ainsi, notant K le module de continuité du superopérateur $\exp(t\mathcal{L})$ du flot de Lindblad, alors :

$$\|\rho_{\text{err}}(t)\| \leq K\epsilon t. \quad (14)$$

Ce résultat indique que l'on ne s'éloigne pas exponentiellement de la trajectoire exacte, mais que la dérive est linéaire. En pratique on observe (voir Fig. 8) que la propriété de contraction de l'opérateur de Lindblad permet de garder l'erreur bornée, pour les systèmes que nous avons simulés.

1.5.4 Tests numériques

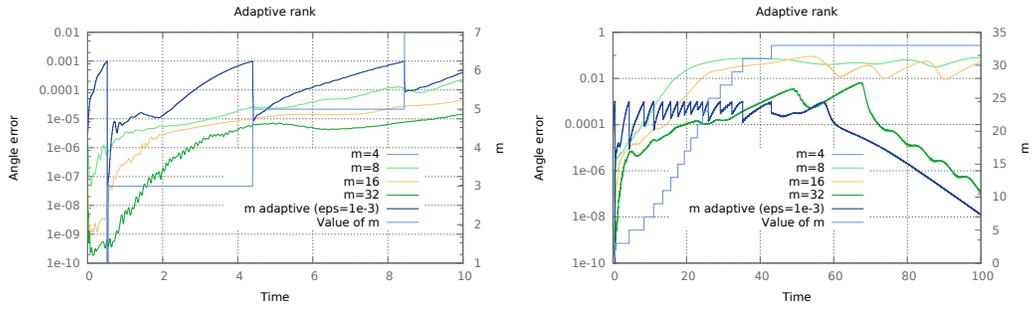
On reprend les simulations précédemment effectuées et on compare les résultats entre rangs fixes et adaptatif. Dans le cas du rang adaptatif on choisit une erreur angulaire $\theta_{\text{max}} = 10^{-3}$ qui détermine le rang :

- Si $\theta_{\text{err}} > \theta_{\text{max}}$ alors on augmente le rang de 1.
- Si la plus petite valeur propre λ_{min} de σ est telle que $\theta_{\text{err}} + \frac{\lambda_{\text{min}}}{\Delta t} < \frac{1}{2}\theta_{\text{max}}$ alors on la retire pour réduire le rang de 1.

La réduction du rang est un processus plus simple que l'augmentation. En effet il suffit de diagonaliser σ et de retirer la plus petite valeur propre ainsi que le vecteur propre associé de U si on juge cela pertinent.

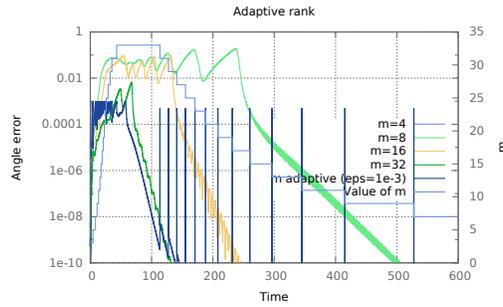
Cette augmentation automatique du rang donne la garantie que l'erreur angulaire est majorée par notre tolérance $\theta_{\text{max}} = 10^{-3}$, ce qui est illustré Fig. 8. On observe que lorsque l'erreur atteint le seuil, l'augmentation du rang par le procédé décrit précédemment (Section 1.5.2) permet de la diminuer significativement. Le rang augmente progressivement avant de se remettre à diminuer, ce qui est cohérent avec l'analyse des valeurs propres de la matrice densité (voir Fig. 3) qui avait été faite. On passe par un régime où le rang $m = 33$ est très grand, et donc où la simulation est très coûteuse, ce qui permet de garder l'erreur faible tout au long de l'évolution.

On illustre de façon qualitative le calcul fait Section 1.5.3, en traçant Fig. 9 la distance $\|\rho_{\text{err}}\|$ entre la solution exacte et les différentes solutions approchées. On observe que pour un rang adaptatif cette erreur est quasiment toujours décroissante. Cela montre que la façon dont on détermine la direction à ajouter lorsque l'on augmente le rang est pertinente, et qu'elle permet un contrôle durable de l'erreur.



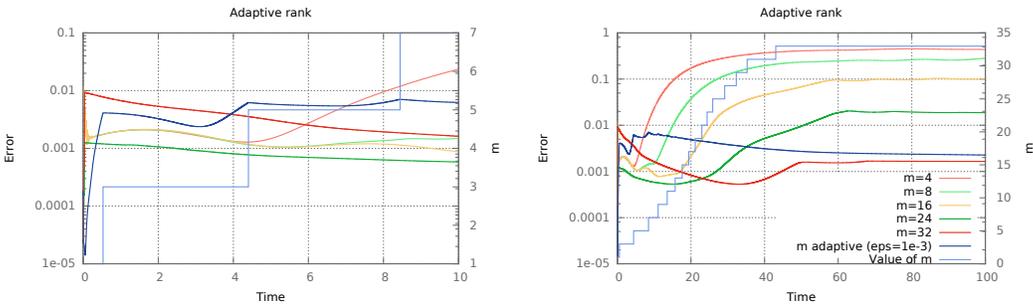
(a) Intervalle de temps $0 \leq \phi \leq 10$

(b) Intervalle de temps $0 \leq \phi \leq 100$



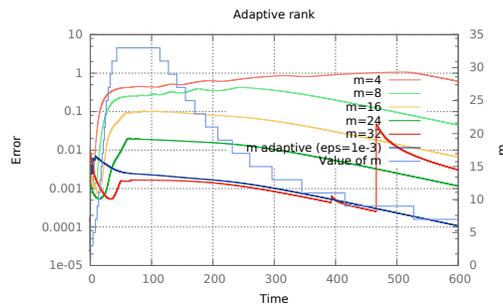
(c) Intervalle de temps $0 \leq \phi \leq 600$

FIGURE 8 – Représentation de l’erreur angulaire de projection en fonction du temps pour la méthode rang-réduit avec différents rangs m



(a) Intervalle de temps $0 \leq \phi \leq 10$

(b) Intervalle de temps $0 \leq \phi \leq 100$



(c) Intervalle de temps $0 \leq \phi \leq 600$

FIGURE 9 – Représentation de la distance à la solution en fonction du temps pour la méthode rang-réduit avec différents rangs m

2 Méthodes de Monte-Carlo

L'équation de Lindblad peut s'interpréter de façon probabiliste. En effet la matrice densité correspond à la mesure $\langle \psi | \rho(t) | \psi \rangle$ associée à la probabilité que le système soit dans l'état ψ à l'instant t . Il est possible d'échantillonner cette mesure de probabilité par une méthode de Monte-Carlo (QMC, voir les chapitres 6 et 7 de [1]) en générant des trajectoires stochastiques appelées *unravelling* de l'équation de Lindblad. Ces trajectoires sont générées par une équation différentielle stochastique telle que le projecteur $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ associé à l'état $|\psi(t)\rangle$ à l'instant t ait pour espérance la matrice densité $\rho(t)$:

$$\forall t, \quad \mathbb{E}[|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|] = \rho(t).$$

Par dérivation, cette relation implique que l'équation de Lindblad est l'équation de Fokker-Planck associée au projecteur $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$. Par la suite on dira qu'une telle EDS est consistante avec Lindblad, ce qui signifie que :

$$\forall t, \quad \frac{d}{dt} \mathbb{E}[|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|] = \frac{d}{dt} \rho(t) = \mathcal{L}(\rho(t)).$$

La méthode de Monte-Carlo consiste à générer M trajectoires $|\psi_i(t)\rangle$ est d'en faire la moyenne empirique :

$$\bar{\rho}_{\text{MC}}(t) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M |\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|. \quad (15)$$

L'erreur commise est directement liée à la variance de cette moyenne, qui est donnée par le théorème central limite :

$$\|\rho_{\text{err}}(t)\| \approx \sqrt{\text{Var}(\bar{\rho}_{\text{MC}}(t))} \approx \frac{\sqrt{\text{Var}(|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|)}}{\sqrt{M}},$$

donc on s'attachera à évaluer cette variance et à essayer de la minimiser.

Nous verrons que cette EDS peut faire intervenir un processus à saut de Poisson ou bien un processus continu de Wiener, et nous présenterons les deux avant de comparer leurs variances.

2.1 Processus de Poisson

2.1.1 Description

Si l'on revient au système physique étudié, où les photons sont absorbés par les miroirs avec un temps de vie κ^{-1} , il est naturel de considérer des états qui évoluent continûment par morceaux avec des sauts au moment où un photon disparaît. Dans notre cas la consistence de l'équation de Fokker-Planck associée et la variance sont les seuls critères pour le choix de l'EDS.

De tels processus à saut peuvent être construits en utilisant le processus de Poisson N_t d'intensité $I(t)$ inhomogène en temps. Un tel processus est défini par les quatre propriétés :

- $N_0 = 0$.
- Les incréments sont indépendants.
- $\mathbb{P}[N_{t+h} - N_t = 1] = I(t)h + o(h)$.
- $\mathbb{P}[N_{t+h} - N_t > 1] = o(h)$.

Dans ce qui suit on considérera uniquement le processus de Poisson d'intensité $I(t) = \|L\psi(t)\|^2$, et dans les calculs on utilisera l'incrément infinitésimal associé qui vérifie formellement :

$$\begin{cases} dN_t^2 &= dN_t, \\ \mathbb{E}[dN_t] &= \|L\psi(t)\|^2 dt. \end{cases}$$

On peut montrer que l'EDS [4] :

$$d\psi(t) = -iH\psi(t) dt - \frac{1}{2}L^\dagger L\psi(t) dt + \frac{1}{2}\|L\psi(t)\|^2\psi(t)dt + \left(\frac{L\psi(t)}{\|L\psi(t)\|} - \psi(t) \right) dN_t \quad (16)$$

est consistante avec l'équation de Lindblad (voir Annexe A.1). De plus ψ reste normalisé, ce qui est cohérent avec sa signification physique car $\|\psi\|^2$ est une densité de probabilité.

2.1.2 Schéma numérique

Il s'agit d'intégrer la partie continue de la dynamique, et de générer des sauts avec la bonne fréquence. Pour la simulation de la partie continue on notera que dans le cas où la décohérence est très faible on peut supposer par exemple $\kappa \sim \Delta t$, ce qui permet de négliger certains termes du développement en puissances de Δt . On propose un schéma d'ordre 3 adapté à l'intégration de la partie continue, qui résulte d'une décomposition d'opérateurs de type Trotter à laquelle on ajoute une probabilité de saut $\|L\psi(t)\|^2\Delta t$ à chaque itération :

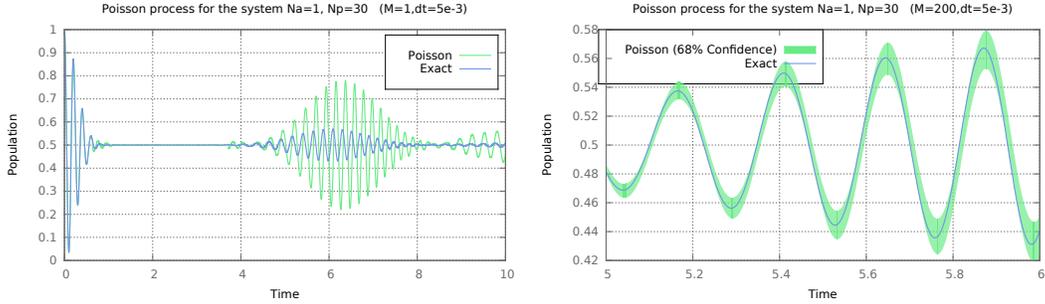
$$\psi_{k+1} = \begin{cases} A_{\Delta t/2} \circ B_{\Delta t} \circ A_{\Delta t/2} \psi_k & \text{avec probabilité } 1 - \|L\psi(t)\|^2\Delta t, \\ L\psi_k & \text{avec probabilité } \|L\psi(t)\|^2\Delta t, \end{cases}$$

où

$$A_{\Delta t}\psi = \psi - i\Delta t H\psi + \frac{\Delta t^2}{2}H^2\psi - \frac{\Delta t^3}{6}H^3\psi,$$

$$B_{\Delta t}\psi = \psi - \frac{\Delta t}{2}L^\dagger L\psi + i\frac{\Delta t^2}{4}(HLL^\dagger + L^\dagger LH)\psi.$$

On représente Fig. 10a l'évolution de la population excitée correspondant à une trajectoire particulière, comparée à la solution exacte. L'évolution stochastique moyenne estimée sur $M = 200$ trajectoires permet d'obtenir la Fig. 10b, où on a représenté l'intervalle d'erreur correspondant à l'écart-type de la moyenne empirique.



(a) Une seule trajectoire

(b) Moyenne de 200 trajectoires avec l'intervalle d'erreur

FIGURE 10 – Population d'états excités pour le processus de Poisson

2.2 Processus de Wiener

On rappelle que le processus de Wiener est une martingale presque sûrement continue dont les incréments sont gaussiens. L'incrément infinitésimal vérifie formellement :

$$\begin{cases} \mathbb{E}(dW_t^2) = dt, \\ \mathbb{E}(dW_t) = 0, \end{cases}$$

Il permet de définir les deux processus de Wiener suivant, qui génèrent contrairement au processus de Poisson des trajectoires continues mais dérivables nulle part.

2.2.1 Processus naïf

Le processus le plus simple qui soit un *unravelling* de Lindblad est :

$$d\psi = -iH\psi - \frac{1}{2}L^\dagger L\psi + L\psi dW_t, \quad (17)$$

On observe Figure 11 que les trajectoires correspondent à une évolution de la population excitée très différente de l'évolution moyenne déterministe. Ce n'est qu'en moyennant un très grand nombre de trajectoires que l'on converge lentement vers la solution, ce qui montre que la variance de ce processus naïf est très élevée. C'est pour cette raison que l'on n'utilisera pas ce processus dans la suite.

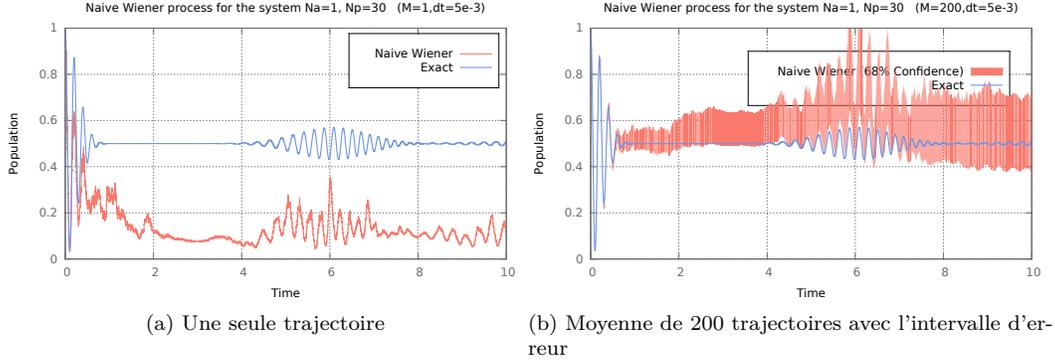


FIGURE 11 – Population d'états excités pour le processus de Wiener naïf

2.2.2 Processus corrigé

Description L'équation précédente est corrigée par l'ajout de trois termes qui permettent d'avoir une variance plus faible, sans perdre la consistance avec l'équation de Lindblad (voir Annexe A.2). Il s'agit du processus de Wiener rencontré usuellement en physique quantique [1], qui est défini par :

$$d\psi(t) = D_1(\psi(t)) dt + D_2(\psi(t)) dW_t. \quad (18)$$

avec le terme de dérive :

$$D_1(\psi) = -iH\psi + \frac{1}{2} \left(\langle L + L^\dagger \rangle_\psi L - L^\dagger L - \frac{1}{4} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 \right) \psi, \quad (19)$$

le terme de diffusion :

$$D_2(\psi) = \left(L - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \right) \psi, \quad (20)$$

et la notation :

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle. \quad (21)$$

On vérifie Fig. 12 que cette correction permet de converger beaucoup plus vite vers l'évolution moyenne (comparé à Fig. 11) lorsque M augmente. A incertitude fixée, cette correction permet donc d'obtenir le résultat pour un nombre de répliques très réduit.

Un schéma intégrant la variable aléatoire $\psi(t)$ est dit d'ordre fort α si

$$\forall T, \exists \Delta t^*, C \quad \text{tq} \quad \forall 0 < \Delta t \leq \Delta t^*, \forall 0 \leq k\Delta t \leq T, \quad \mathbb{E} [\|\psi(k\Delta t) - \psi_k\|] \leq C\Delta t^\alpha$$

et il est dit d'ordre faible α si

$$\forall T, \forall \Phi \text{ continue}, \exists \Delta t^*, C \quad \text{tq} \quad \forall 0 < \Delta t \leq \Delta t^*, \forall 0 \leq k\Delta t \leq T, \quad |\mathbb{E} [\Phi(\psi(k\Delta t)) - \Phi(\psi_k)]| \leq C\Delta t^\alpha$$

où $\psi(t)$ est la solution exacte de l'EDS et où ψ_k est la solution approchée au temps $t_k = k\Delta t$. Nous nous intéresserons principalement à l'erreur faible car c'est elle qui quantifie les propriétés moyennes des trajectoires générées. L'erreur forte quant à elle est plus exigeante car elle mesure l'écart en terme de trajectoires. Passons en revue trois schémas distincts permettant d'intégrer le processus considéré, et analysons leurs ordres respectifs (Fig. 13).

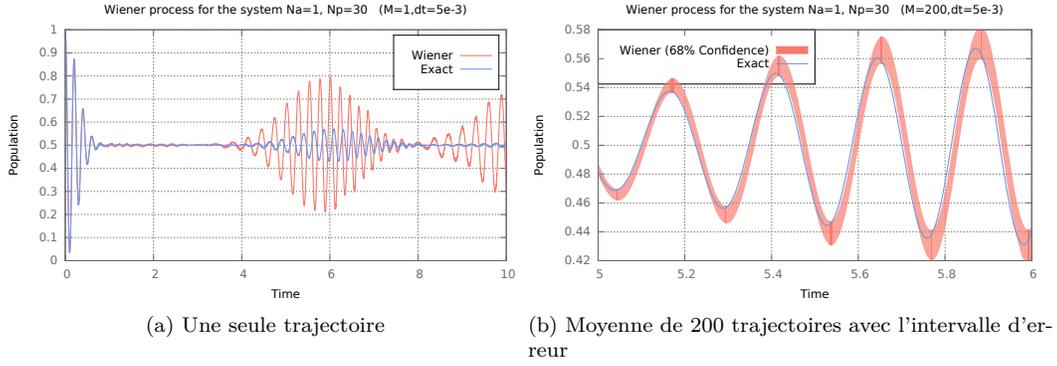


FIGURE 12 – Population d'états excités pour le processus de Wiener naïf

Schéma de Romberg-Richardson Le premier schéma que l'on considère repose sur une interpolation de Romberg-Richardson [5]. Cette dernière utilise deux pas de temps distincts pour atteindre un ordre faible 2. On note $A_{\Delta t}(\psi) = D_1(\psi)\Delta t + D_2(\psi)W_n\sqrt{\Delta t}$ l'incrément d'Euler-Maruyama pour un pas de temps Δt au point ψ_k , alors le schéma s'écrit :

$$\psi_{k+1} = 2\psi_{k+1}^2 - \psi_{k+1}^1$$

avec

$$\begin{aligned}\psi_{k+1}^1 &= \psi_k + A_{\Delta t}(\psi_k) \\ \psi_{k+1/2}^2 &= \psi_k + A_{\Delta t/2}(\psi_k) \\ \psi_{k+1}^2 &= \psi_{k+1/2}^2 + A_{\Delta t/2}(\psi_{k+1/2}^2)\end{aligned}$$

où les deux gaussiennes utilisées pour l'intégration en $\Delta t/2$ sont de somme égale à celle utilisée pour l'intégration en Δt .

Schéma de Platen On considère à présent un second schéma d'ordre faible 2 proposé par Platen [7]. Il s'écrit :

$$\begin{aligned}\psi_{k+1} &= \psi_k + \frac{1}{2} \left(D_1(\widetilde{\psi}_k) + D_1(\psi_k) \right) \Delta t \\ &\quad + \frac{1}{4} \left(D_2(\psi_k^+) + D_2(\psi_k^-) + 2D_2(\psi_k) \right) W_k \sqrt{\Delta t} \\ &\quad + \frac{1}{4} \left(D_2(\psi_k^+) - D_2(\psi_k^-) \right) (W_k^2 - 1) \sqrt{\Delta t}\end{aligned}$$

où :

$$\begin{aligned}\widetilde{\psi}_k &= \psi_k + D_1(\psi_k)\Delta t + D_2(\psi_k)W_k\sqrt{\Delta t} \\ \psi_k^\pm &= \psi_k + D_1(\psi_k)\Delta t \pm D_2(\psi_k)\sqrt{\Delta t}.\end{aligned}$$

Schéma proposé par P.Rouchon et JF.Ralph On présente finalement un troisième schéma introduit dans le cadre du contrôle quantique [11] qui a une erreur forte d'ordre 1, dont les trajectoires sont donc plus précises que pour les autres schémas. Cependant il a une erreur faible d'ordre 1, et il est donc moins précis que les deux schémas précédents pour le calcul d'une observable. Ce schéma s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{cases} \Delta y_n &= \langle L + L^\dagger \rangle_{\psi_n} \Delta t + W_n \sqrt{\Delta t}, \\ \widetilde{\psi}_n &= \psi_n - i H \psi_n \Delta t - \frac{1}{2} L^\dagger L \psi_n \Delta t + L \psi_n \Delta y + \frac{1}{2} L^2 \psi_n ((\Delta y_n)^2 - \Delta t) \\ \psi_{n+1} &= \frac{\widetilde{\psi}_n}{\|\widetilde{\psi}_n\|} \end{cases}$$

Comparatif des erreurs On illustre les ordres faibles annoncés précédemment pour les différents schémas en prenant la fonction test particulière Φ donnant la population d'états excités. On s'intéresse à l'erreur sur cette observable au temps $T = 10^{-2}$ et on effectue une moyenne sur $M = 10^4$ répliques partant d'un état commun tiré aléatoirement. Pour un schéma et un pas de temps donnés, on représente l'erreur au temps final commis sur l'observable population excitée. On vérifie que l'erreur tend bien vers 0 avec le pas de temps, et donc que ces schémas sont consistants. La Fig. 13 confirme que les schémas Platen et Romberg-Richardson sont bien d'ordre 2, alors que les schémas Euler-Maruyama et Rouchon-Ralph sont d'ordre 1. Dans toute la suite on utilisera le schéma de Platen quand il s'agira d'intégrer un processus de Wiener, car il est particulièrement précis.

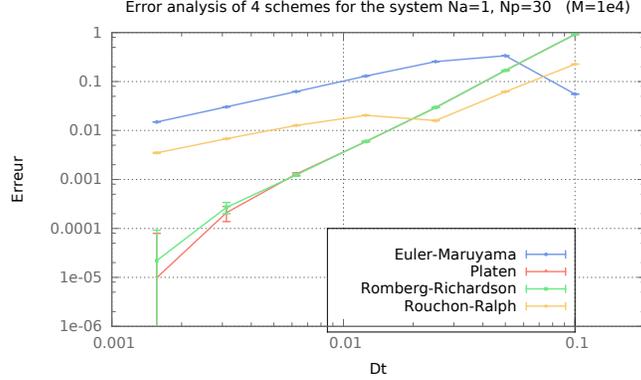


FIGURE 13 – Erreur commise sur l'observable en fonction du pas de temps

2.3 Analyse de la variance

Il nous reste à faire le choix entre le processus de Poisson et le processus de Wiener. Les deux critères sont la rapidité de l'intégration numérique, *ie.* le temps nécessaire pour réaliser une trajectoire, et la variance du processus qui déterminera le nombre de trajectoires nécessaires pour atteindre une erreur statistique satisfaisante. Les deux processus faisant intervenir le même type d'opérations, ils ont des complexités temporelles équivalentes et il reste donc à comparer les variances.

Il y a en fait deux variances susceptibles de nous intéresser. La première est la variance de l'observable population excitée \mathcal{O}_{pop} :

$$\sigma_{\text{obs}}^2(t) = \mathbb{E}[(\psi(t)^\dagger \mathcal{O}_{\text{pop}} \psi(t) - \text{Tr}(\mathcal{O}_{\text{pop}} \rho(t)))^2],$$

où $\psi(t)$ est un état généré aléatoirement par le processus stochastique étudié, au temps t . La seconde variance est celle de la matrice densité elle-même, au sens de la norme de Frobenius :

$$\sigma_{\rho}^2(t) = \mathbb{E}[\|\psi(t)\psi(t)^\dagger - \rho(t)\|^2],$$

dont l'estimateur empirique peut être calculé sans avoir à construire la matrice ρ . Par continuité de l'observable \mathcal{O}_{pop} pour la topologie de Frobenius, on s'attend à ce que la première variance soit bornée par la seconde à une constante multiplicative près.

On représente (voir Fig. 14) les deux variances pour les deux processus au cours du temps. On observe que la variance de l'observable est au début la même pour les deux processus, mais que par la suite le processus de Poisson a une variance moindre. Concernant la variance de la matrice densité, elle est presque identique entre les deux processus.

Les deux processus donnent donc des résultats similaires lorsqu'ils sont utilisés en Monte-Carlo. Dans la suite on utilisera uniquement le processus de Wiener car son incrément infinitésimal s'écrit de façon dimensionnée, ce qui s'avérera pratique pour les calculs. Il est néanmoins tout à fait envisageable d'appliquer *mutadis mutandis* ce qui suit au processus de Poisson.

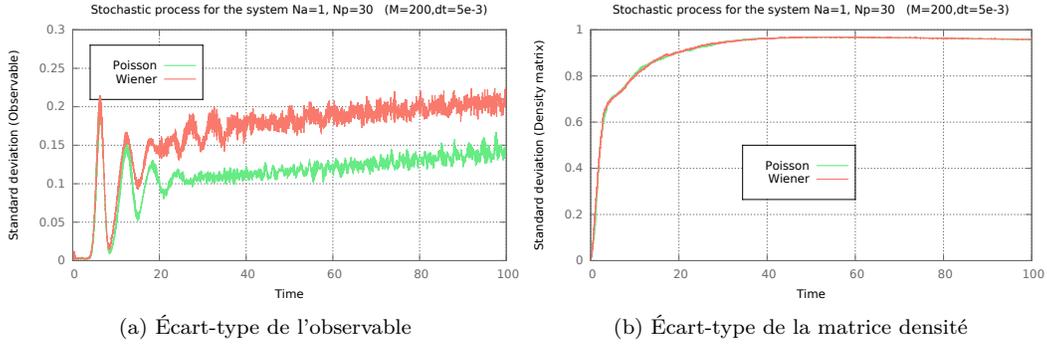


FIGURE 14 – Écart-type calculé pour 200 trajectoires

3 Réduction de variance

Il existe diverses méthodes qui permettent de réduire la variance lors des simulations de type Monte-Carlo. On souhaite ici utiliser la dynamique rang réduit comme variable de contrôle [2], c'est-à-dire la considérer comme un modèle réduit, facile à calculer, du système réel. Il s'agit plus précisément de calculer un nouvel estimateur empirique $\bar{\rho}_{CV}$ de la matrice densité à un instant t par la formule :

$$\bar{\rho}_{CV} = \bar{\rho}_{MC} + \lambda(\rho_{LR} - \bar{\rho}_{MCLR}), \quad (22)$$

où $\bar{\rho}_{MC} = \frac{1}{M} \sum_i |\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|$ est la moyenne empirique obtenue par MC (cf. 2.2), ρ_{LR} la matrice obtenue par la dynamique rang réduit et $\bar{\rho}_{MCLR}$ la moyenne obtenue par la méthode "Monte Carlo Rang Réduit" (MCLR par la suite) dont la définition est l'objet de la Section 3.1. Cette dynamique stochastique réduite doit être telle que (22) soit un estimateur non biaisé de la solution ρ de Lindblad (1), et dont la variance soit plus petite que celle de l'estimateur de Monte-Carlo initial $\bar{\rho}_{MC}$, c'est-à-dire :

$$\begin{cases} \mathbb{E}[\bar{\rho}_{MCLR}(t)] = \rho_{LR}(t), \\ Var[\bar{\rho}_{MC}(t) - \lambda\bar{\rho}_{MCLR}(t)] \ll Var[\bar{\rho}_{MC}(t)]. \end{cases}$$

Le paramètre réel λ est optimisé de façon à minimiser la variance de l'observable d'intérêt. Dans le cas où on s'intéresse à la matrice densité, un bref calcul montre que la valeur optimale est :

$$\lambda = \frac{Cov(\rho_{MC}, \rho_{MCLR})}{Var(\rho_{MC})},$$

c'est-à-dire que le paramètre vaut 1 lorsque le modèle réduit est très représentatif mais qu'il est proche de 0 si au contraire les trajectoires ψ_{MC} et ψ_{MCLR} sont décorrélées. Si $\lambda \approx 1$ alors la réduction de variance est efficace et si $\lambda \approx 0$ alors $\bar{\rho}_{CV} \approx \bar{\rho}_{MC}$ donc le modèle réduit n'apporte aucune correction.

On notera qu'il s'agit de construire une dynamique stochastique réduite en supposant connue la dynamique déterministe réduite. En effet il est de toute façons nécessaire de calculer indépendamment l'évolution de $U(t)$ et de $\sigma(t)$ pour effectuer la réduction de variance (22), donc dans ce qui suit on se permettra d'utiliser ces deux matrices pour définir notre processus MCLR.

3.1 Choix de l'EDS pour le Monte-Carlo Rang Réduit

La solution rang réduit suit exactement la dynamique approchée (6) que l'on rappelle ici :

$$\frac{d}{dt}\rho = \mathcal{L}^\parallel(\rho) = -i[H, \rho] - \frac{1}{2}(L^\dagger L\rho + \rho L^\dagger L) + L\rho L^\dagger - (\mathbb{I}_n - P)L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P) + \frac{\text{Tr}(L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P))}{m}P \quad (23)$$

où $P(t) = U(t)U^\dagger(t)$. La méthode MCLR doit donc reposer sur une EDS qui soit un *unravelling* de cette dynamique. De plus elle doit être corrélée avec la simulation MC de base afin que la variance de $\bar{\rho}_{MC} - \lambda\bar{\rho}_{MCLR}$

soit faible. L'idée est de simuler M paires de trajectoires, constituées d'une trajectoire consistante avec (1) et d'une trajectoire consistante avec (23), utilisant toutes deux le même mouvement brownien. On souhaite que ces deux trajectoires soient durablement corrélées, afin que la variance de leur différence soit faible.

3.1.1 EDS 1

La première approche à laquelle on peut penser consiste à suivre la dynamique (18) mais en projetant à chaque itération sur l'image de la base réduite U donnée par la dynamique déterministe rang réduit, puis de renormaliser :

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(t+dt) &= D_1(\psi(t))dt + D_2(\psi(t))dW_t \\ \psi(t+dt) &= \frac{P\tilde{\psi}(t+dt)}{\|P\tilde{\psi}(t+dt)\|}.\end{aligned}$$

Cependant l'équation de Fokker-Planck associée à $|\psi\rangle\langle\psi|$ ne semble pas être l'équation de Lindblad. L'utiliser pour faire de la réduction de variance introduirait donc un biais, qui peut être évalué et contré en faisant du multi-level Monte-Carlo ou une extrapolation de Romberg sur λ par exemple.

Numériquement cette approche donne des résultats sur les premiers pas de temps si on ne fait rien pour se débarrasser du biais. Cependant on s'attend à ce que le biais s'accumule au cours du temps et pose des problèmes assez rapidement.

3.1.2 EDS 2

Une solution assez directe permettant d'avoir consistence avec (23) est de rajouter des termes stochastiques indépendants dont les termes d'Itô associés reproduisent les termes d'erreur dus au rang réduit :

$$d\psi(t) = D_1(\psi(t))dt + D_2(\psi(t))dW^1(t) + i(\mathbb{I}_n - P(t))L\psi dW^2(t) + \frac{\|(\mathbb{I}_n - P(t))L\psi\|}{\sqrt{m}}U(t) \cdot dW^3(t) \quad (24)$$

où $U(t)$ et $P(t)$ sont calculés par la dynamique rang réduit déterministe (5), et où les trois mouvements browniens sont indépendants et $dW^3 \in \mathbb{R}^m$. On prend dW^1 identique à celui utilisé en MC de base pour introduire la corrélation nécessaires entre les deux processus. Le problème de cette approche est que les mouvements browniens dW^2 et dW^3 risquent de réintroduire du bruit, et donc de décorrélérer la solution de son analogue issue de (18). De plus il est nécessaire d'avoir un préfacteur imaginaire pur devant le second mouvement brownien, donc des états complexes. Cela n'est pas souhaitable d'un point de vue numérique car on doublerait le nombre de degrés de liberté du système, ce qui augmenterait significativement les temps de calculs.

3.1.3 EDS 3

Une troisième idée est d'écrire directement les états $\psi(t)$ sous une bonne forme réduite. On souhaite que la matrice densité moyenne soit égale à la matrice densité rang réduit $\rho_{MCLR}(t) = \rho_{LR}(t) = U(t)\sigma(t)U^\dagger(t)$. Il paraît donc naturel de prendre des trajectoires $\psi(t)$ qui restent dans l'espace engendré à tout temps t par la base réduite $U(t)$:

$$\psi(t) = U(t)\nu(t)$$

où $\nu(t) \in \mathbb{R}^m$ est issu d'un processus stochastique qui reste à choisir. Dans ce but, montrons à présent le résultat suivant.

Proposition Considérons :

$$d\nu(t) = U^\dagger D_1^0(\psi)dt + U^\dagger D_2(\psi)dW + \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho L^\dagger)}{2m}\sigma^{-1}U^\dagger\psi dt \quad (25)$$

avec le terme de dérive (19) auquel on a retiré la partie Hamiltonienne :

$$D_1^0(\psi) = \frac{1}{2} \left(\langle L + L^\dagger \rangle_\psi L - L^\dagger L - \frac{1}{4} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 \right) \psi, \quad (26)$$

et le terme de diffusion défini en (20) :

$$D_2(\psi) = \left(L - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \right) \psi. \quad (27)$$

Alors $\psi(t) = U(t)\nu(t)$ suit l'évolution stochastique :

$$\begin{aligned} d\psi(t) &= PD_1^0(\psi) dt + PD_2(\psi)dW + \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho L^\dagger)}{2m} U\sigma^{-1}U^\dagger\psi dt \\ &+ (\mathbb{I}_n - P) \left(-\frac{1}{2}L^\dagger L + LU\sigma U^\dagger L^\dagger U\sigma^{-1}U^\dagger \right) \psi dt \end{aligned} \quad (28)$$

et il définit une matrice densité $\rho_{\text{MCLR}}(t) = \mathbb{E}[|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|]$ solution de l'équation de Lindblad rang réduit (23).

Preuve On note de la façon suivante l'EDS suivie par $\nu(t) \in \mathbb{R}^m$:

$$d\nu = A(\nu(t), U(t), \sigma(t), t)\psi(t) dt + B(\nu(t), U(t), \sigma(t), t)dW.$$

On cherche les opérateurs A et B tels que les trajectoires $\psi(t) = U(t)\nu(t)$ soient consistantes avec (23). Pour cela on calcule l'équation de Fokker-Planck du projecteur associé par un calcul d'Itô :

$$\begin{aligned} d\psi &= dU\nu + U d\nu \\ &= -iHU\nu + (\mathbb{I}_n - P)\left(-\frac{1}{2}L^\dagger L + LU\sigma U^\dagger L^\dagger U\sigma^{-1}U^\dagger\right)U\nu + UA\psi dt + UBdW \end{aligned}$$

où dU est donné par (5). On rappelle que $U(t)$ et $\sigma(t)$ sont supposés donnés car calculés indépendamment par la simulation déterministe rang réduit. On dérive ensuite l'espérance du projecteur associé en supposant que $\mathbb{E}[|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|] = \rho(t) = U(t)\sigma(t)U^\dagger(t)$, *ie.* que jusqu'au temps t notre EDS est consistante avec (23) :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho &= (\mathbb{I}_n - P)\left(-\frac{1}{2}L^\dagger L + LU\sigma U^\dagger L^\dagger U\sigma^{-1}U^\dagger\right)\rho + \rho\left(-\frac{1}{2}L^\dagger L + U\sigma^{-1}U^\dagger LU\sigma U^\dagger L^\dagger\right)(\mathbb{I}_n - P) \\ &- i[H, \rho] + UA\rho + \rho A^\dagger U^\dagger + UBB^\dagger U^\dagger \\ &= (\mathbb{I}_n - P)\left(-\frac{1}{2}L^\dagger L\rho + LU\rho U^\dagger L^\dagger P\right) + \left(-\frac{1}{2}\rho L^\dagger L + PL\rho L^\dagger\right)(\mathbb{I}_n - P) \\ &- i[H, \rho] + UA\rho + \rho A^\dagger U^\dagger + UBB^\dagger U^\dagger. \end{aligned}$$

En retranchant l'équation (23) on obtient après simplification :

$$0 = -\frac{\text{Tr}(L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P))}{m} P + \left(\frac{1}{2}PL^\dagger L + UA\right)\rho + \rho\left(\frac{1}{2}L^\dagger LP + A^\dagger U^\dagger\right) - PL\rho L^\dagger P + UBB^\dagger U^\dagger \quad (29)$$

Le fait qu'il soit possible d'utiliser ρ , σ et U dans les expressions de A et B laisse une certaine liberté à ce stade. On a envie d'une part d'avoir un terme stochastique similaire à $L\psi dW$ afin de le corrélérer au MC de base, et d'autre part d'éviter d'ajouter du bruit dans MCLR. C'est pourquoi on prend dans un premier temps :

$$B = U^\dagger L\psi,$$

ce qui implique :

$$A = -\frac{1}{2}U^\dagger L^\dagger L + \frac{\text{Tr}(L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P))}{2m}\sigma^{-1}U^\dagger$$

On obtient donc l'EDS :

$$d\nu(t) = -\frac{1}{2}U^\dagger L^\dagger LU\nu(t) dt + \frac{\text{Tr}(L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P))}{2m}\sigma^{-1}\nu(t) dt + U^\dagger LU\nu(t)dW \quad (30)$$

qui correspond à une évolution sur ψ :

$$d\psi(t) = -\frac{1}{2}L^\dagger L\psi(t) dt + PL\psi(t)dW + \left(\frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho L^\dagger)}{2m} + (\mathbb{I}_n - P)L\rho L^\dagger \right) \rho^{-1}\psi(t) dt \quad (31)$$

Cette EDS sur ψ est analogue à l'EDS naïve (17), à des termes de correction près qui s'annulent lorsque $P = \mathbb{I}_n$. On peut raisonnablement penser que si l'on corrige cette EDS de façon analogue à ce qui a été fait Section 2.2, on améliorera de même ses performances numériques. Pour cela on remplace formellement $-\frac{1}{2}L^\dagger L\psi$ par D_1^0 et $L\psi$ par D_2 . On remarque qu'il n'y a pas ici de terme Hamiltonien car ce dernier s'est simplifié lors du calcul précédent. Ainsi le Hamiltonien n'apparaît pas dans l'évolution de ν , de même qu'il n'apparaissait pas dans l'évolution de σ .

On obtient finalement l'EDS MCLR :

$$d\nu(t) = U^\dagger D_1^0(\psi) dt + U^\dagger D_2(\psi)dW + \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho L^\dagger)}{2m} \sigma^{-1} U^\dagger \psi dt \quad (32)$$

qui est celle que l'on utilisera par la suite. On remarque que le troisième terme, qui fait intervenir σ^{-1} , est issu du terme de l'équation de Lindblad rang réduit qui permet la conservation de la trace à 1. On notera que l'évolution correspondante sur $\psi(t) = U(t)\nu(t)$ est :

$$d\psi(t) = PD_1(\psi) dt + PD_2(\psi)dW + \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho L^\dagger)}{2m} \rho^{-1}\psi dt + (\mathbb{I}_n - P) \left(-\frac{1}{2}L^\dagger L + LU\sigma U^\dagger L^\dagger U\sigma^{-1}U^\dagger \right) \psi dt \quad (33)$$

On montre (voir Annexe A.3) que cette EDS est toujours consistante avec (23), et qu'elle conserve en moyenne le caractère unitaire des états. Nous avons vérifié numériquement la consistance en montrant que la solution déterministe rang réduit ρ_{LR} était toujours dans un intervalle de confiance raisonnable autour de la solution MCLR obtenue par la nouvelle EDS.

Complexité La dynamique déterministe rang réduit a un coût $\mathcal{O}(nm^2)$, la dynamique MCLR a un coût $\mathcal{O}(mM)$ et la dynamique MC a un coût $\mathcal{O}(nM)$. La réduction de variance est donc pratiquement gratuite tant que $m^2 \ll M$, ce qui est le cas dans le cas test choisi.

3.2 Résultats numériques

On reprend le même système que précédemment et on compare les résultats donnés par la méthode de Monte-Carlo avec et sans réduction de variance, pour le même nombre $M = 200$ de répliques. On choisit un rang réduit $m = 2$ fixe, de façon à ce que la dynamique rang réduit soit très rapide à simuler. On sait que à partir du temps adimensionné $\phi \approx 10$ l'hypothèse de rang réduit ne sera plus vérifiée mais on espère que les trajectoires rang réduit resteront néanmoins corrélée aux trajectoires rang plein, permettant ainsi une réduction de variance.

Dans les tests qui suivent on a intégré numériquement l'EDS (32) en utilisant le même schéma de Platen que celui utilisé pour la partie MC 2.2.2. Le paramètre λ est ajusté pour minimiser soit la variance de l'observable population soit la variance de la matrice densité, selon ce que l'on souhaite étudier. On notera que cela ne change pas la dynamique et qu'il est donc préférable de calculer le λ optimal pour chaque valeur de sortie.

La figure Fig. 15a montre une très bonne réduction de la variance de la matrice densité, et un résultat moins marqué concernant la variance de l'observable Fig. 15b. Cela est dû au fait que la dynamique rang réduit minimise l'erreur de projection au sens de Frobenius lors de l'évolution, et non l'erreur faite sur l'observable. On voit très bien que le λ_ρ associé à la matrice densité diminue progressivement, ce qui signifie que les trajectoires rang réduit se décorrèlent des trajectoires rang plein. Cela est directement lié aux remarques faites lors de l'étude de la méthode de rang réduit, à savoir que la dynamique passe par un régime où le rang effectif est très élevé.

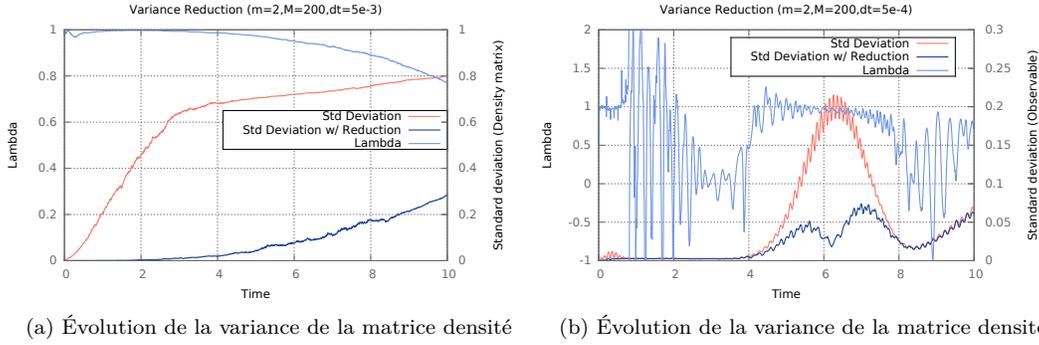


FIGURE 15 – Variances sur l’observable et sur la matrice densité avec et sans réduction de variance

Perspectives

De façon à s’assurer que le modèle rang réduit reste un minimum représentatif de la solution exacte, une solution naturelle à ce point est d’utiliser un rang adaptatif dans le modèle réduit. Un tel développement ne pose pas de problème théorique, mais n’a pas encore été implémenté.

On observe Fig. 16 que l’on ne récupère pas de corrélation lorsque le rang effectif diminue, dans la dernière partie de la dynamique. Cela n’est pas surprenant car une fois que la solution de rang réduit s’est éloignée de la solution exacte, l’erreur subsiste jusqu’à la fin. Une façon de recommencer à faire de la réduction de variable lorsque le rang effectif redevient suffisamment faible serait de réinitialiser la simulation MCLR. On pourrait par exemple calculer une nouvelle forme réduite U, σ de la matrice densité à partir des états ψ_i , par une sorte d’analyse en composantes principales, puis projeter ces derniers sur l’image de la matrice U ainsi calculée pour obtenir un nouveau set ν_i .

La méthode de rang réduit exposée dans ce rapport est très proche en idée des *Multiconfiguration time-dependent Hartree methods* (MCTDH) [10], qui reposent sur une forme réduite approchée des états ψ utilisant la structure tensorielle de l’espace des phases. Il serait intéressant d’essayer d’utiliser un rang adaptatif dans ce contexte, et éventuellement de s’en servir pour réduire la variance des méthodes de Monte-Carlo associées. Inversement des schémas permettant d’intégrer la dynamique de rang réduit (5) sans inverser la matrice σ ont été développés par C. Lubich [9], et pourraient être adaptés au cadre considéré ici. L’inversion de σ peut en effet poser problème quand cette dernière est mal conditionnée, comme par exemple au premier pas de temps. On peut voir Fig. 9a que plus le rang m est grand et plus on commet une erreur importante à l’instant initial, à cause de cette inversion. Par la suite ce problème est évité car la contrainte de trace égale à 1 conduit à l’introduction de termes de régularisation sur la diagonale.

Enfin on peut noter que les connections entre la MCTDH et les matrices densité de rang réduit ont déjà été étudiées [8]. Les techniques ρ -MCTDH correspondantes reposent sur les mêmes idées que celles de [3].

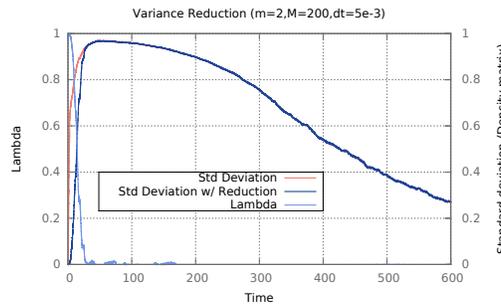


FIGURE 16 – Variance sur la matrice densité avec et sans réduction de variance, en temps long

Références

- [1] H.P. Breuer. *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford University Press, 2002.
- [2] C. Le Bris and T. Lelièvre. *Multiscale modelling of Complex Fluids : A Mathematical Initiation*. Springer, 2009.
- [3] C. Le Bris and P. Rouchon. Low rank approximation for the numerical simulation of high dimensional lindblad and riccati equations. *Phys. Rev. A*, 2013.
- [4] J. Dalibard, Y. Castin, and K. Mølmer. Wave-function approach to dissipative processes in quantum optics. *Phys. Rev. Let.*, 1992.
- [5] C. Graham and D. Talay. *Simulation stochastique et méthodes de Monte-Carlo*. Ecole Polytechnique, 2011.
- [6] S. Haroche and J.M. Raimond. *Exploring the Quantum Atoms, Cavities and Photons*. Oxford University Press, 2006.
- [7] P.E. Kloedden and E. Platen. *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*. Springer, 1991.
- [8] S. Kvaal. Multiconfigurational time-dependent hartree method to describe particle loss due to absorbing boundary conditions. *Phys. Rev. A*, 2011.
- [9] C. Lubich, I. Oseledets, and B. Vandereycken. A projector-splitting integrator for dynamical low-rank approximation. *BIT*, 2013.
- [10] H.D. Meyer, F. Gatti, and G.A. Worth. The multi-configurational time-dependent hartree approach. *Chem. Phys. Letters*, 1990.
- [11] P. Rouchon and J.F. Ralph. Efficient quantum filtering for quantum feedback control. *Phys. Rev. A*, 2015.

Bilan personnel

Ce stage m'a permis d'approfondir ma connaissance du monde de la recherche, car c'est la première fois que j'effectue un stage dans un laboratoire académique français, ainsi que de renforcer mes compétences sur le plan technique. Tout d'abord j'ai eu l'occasion de développer intégralement un code de simulation en C++, ce qui m'a permis de renforcer mes compétences en programmation. Ensuite j'ai pour la première fois effectué de réels calculs mathématiques lorsque j'ai dû trouver la direction optimale pour l'augmentation de rang et imaginer l'EDS MCLR permettant de faire de la réduction de variance. Ce travail était nouveau pour moi, car j'étais resté presque exclusivement sur des thèmes physiques et numériques dans mes recherches précédentes. J'ai maintenant une idée plus claire de ce qu'est la recherche mathématique, grâce aux riches interactions scientifiques avec Claude au cours desquelles il a eu l'idée initiale de la réduction de variance. Enfin mes lectures et les nombreuses interactions avec Pierre m'ont beaucoup appris sur la physique quantique, d'un point de vue plus expérimental que ce que j'avais rencontré jusque là, et sur les méthodes mathématiques associées. C'est pourquoi la pédagogie et la grande expérience de mes deux tuteurs m'ont beaucoup apporté sur le plan scientifique.

Au delà des compétences ce stage m'a permis de côtoyer des doctorants, et a confirmé mon projet de thèse. En effet suite à cette expérience je retournerai au Cermics à partir de septembre pour commencer un doctorat sur les méthodes de réduction de variance pour les dynamiques hors d'équilibre. L'expérience que j'ai acquise en développant la méthode à variable de contrôle exposée dans ce rapport sera alors des plus précieuses, et j'espère qu'elle m'inspirera de nouvelles idées dans cet autre contexte. Grâce à Claude j'ai également eu l'opportunité de participer à un séminaire à Oberwolfach, qui était plus axé mathématique que ceux auxquels j'avais déjà assisté. Le haut niveau scientifique de cet événement et la qualité des participants me confortent bien sûr dans l'idée de continuer à travailler au Cermics.

Le travail présenté dans le présent rapport devrait prochainement faire l'objet d'une publication.

A Calculs d'Itô

Dans les annexes ci-dessous on effectuera les calculs formellement à l'aide des incréments infinitésimaux dN_t et dW_t , la reformulation sous la forme de calcul d'Itô rigoureusement écrits étant immédiate. Le but est de faire apparaître dans un premier temps des incréments trajectoriels, puis de les moyenner pour obtenir l'équation de Fokker-Planck qui serait le résultat du calcul d'Itô proprement dit.

A.1 Processus de Poisson

On considère l'EDS :

$$d\psi(t) = -iH\psi(t) dt - \frac{1}{2}L^\dagger L\psi(t) dt + \frac{1}{2}\|L\psi(t)\|^2\psi(t)dt + \left(\frac{L\psi(t)}{\|L\psi(t)\|} - \psi(t) \right) dN_t.$$

Conservation de la norme

Calculons l'évolution de la norme de ψ due à cette EDS.

$$\begin{aligned} d\|\psi\|^2 &= d\psi^\dagger\psi + \psi^\dagger d\psi + d\psi^\dagger d\psi \\ &= -\frac{1}{2}\psi^\dagger L^\dagger L\psi dt + \left(\frac{\psi^\dagger L^\dagger \psi}{\|L\psi\|} - \|\psi\|^2 \right) dN + \frac{1}{2}\|L\psi\|^2 \\ &\quad - \frac{1}{2}\psi^\dagger L^\dagger L\psi dt + \left(\frac{\psi^\dagger L\psi}{\|L\psi\|} - \|\psi\|^2 \right) dN + \frac{1}{2}\|L\psi\|^2 \\ &\quad + \left(\frac{\psi^\dagger L^\dagger}{\|L\psi\|} - \psi^\dagger \right) \left(\frac{L\psi}{\|L\psi\|} - \psi \right) dN \\ &= -\psi^\dagger L^\dagger L\psi dt + \left(\frac{\psi^\dagger (L + L^\dagger)\psi}{\|L\psi\|} - 2\|\psi\|^2 \right) dN + \|L\psi\|^2 \\ &\quad + \left(\frac{\psi^\dagger L^\dagger L\psi}{\|L\psi\|^2} - \frac{\psi^\dagger (L + L^\dagger)\psi}{\|L\psi\|} + \|\psi\|^2 \right) dN \\ &= (1 - \|\psi\|^2) dN \end{aligned}$$

Cette EDS conserve donc exactement la norme à $\|\psi\| = 1$. De plus si un schéma d'intégration apportait une perturbation alors la renormalisation après chaque saut permettrait d'éviter toute dérive de la norme.

Consistance avec Lindblad

Vérifions la consistance avec Lindblad. On se place dans le repère tournant de H et on note $\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$. Le projecteur associé à un état ψ donné à pour incrément :

$$\begin{aligned} d|\psi\rangle\langle\psi| &= |d\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle d\psi| + |d\psi\rangle\langle d\psi| \\ &= -\frac{1}{2}L^\dagger L\rho_\psi dt + \frac{1}{2}\|L\psi\|^2\rho_\psi dt + \left(\frac{L\rho_\psi}{\|L\psi\|} - \rho_\psi \right) dN \\ &\quad + -\frac{1}{2}\rho_\psi L^\dagger L dt + \frac{1}{2}\|L\psi\|^2\rho_\psi dt + \left(\frac{\rho_\psi L^\dagger}{\|L\psi\|} - \rho_\psi \right) dN + \left(\frac{L\psi}{\|L\psi\|} - \psi \right) \left(\frac{\psi^\dagger L^\dagger}{\|L\psi\|} - \psi^\dagger \right) dN. \end{aligned}$$

L'évolution de la matrice densité associée est donnée par l'espérance de l'incrément précédent :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\mathbb{E}[\rho_\psi] &= -\frac{1}{2}L^\dagger L\rho + -\frac{1}{2}\rho L^\dagger L + \|L\psi\|^2\rho + \left(\frac{L\rho + \rho L^\dagger}{\|L\psi\|} - 2\rho \right) \|L\psi\|^2 + \left(\frac{L\rho L^\dagger}{\|L\psi\|^2} - \frac{L\rho + \rho L^\dagger}{\|L\psi\|} + \rho \right) \|L\psi\|^2 \\ &= -\frac{1}{2}L^\dagger L\rho + -\frac{1}{2}\rho L^\dagger L + L\rho L^\dagger. \end{aligned}$$

A.2 Processus de Wiener

Afin de comprendre d'où vient le processus de Wiener corrigé on ajoute un opérateur A à la partie déterministe du processus naïf et un terme scalaire $-\frac{1}{2}k \in \mathbb{R}$ à la partie stochastique :

$$d\psi(t) = \left(-\frac{1}{2}L^\dagger L + A\right)\psi dt + \left(L - \frac{1}{2}k\right)dW_t.$$

Consistance avec Lindblad

Cherchons quelles sont les conditions sur A et k pour avoir consistance avec Lindblad. On se place dans le repère tournant de H , et on note $\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$:

$$\begin{aligned} d\rho_\psi &= |d\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle d\psi| + |d\psi\rangle\langle d\psi| \\ &= -\frac{1}{2}L^\dagger L\rho_\psi dt + A\rho_\psi dt - \frac{1}{2}\rho_\psi L^\dagger L dt + \rho_\psi A^\dagger dt + L\rho_\psi L^\dagger dW_t^2 - \frac{1}{2}k\rho_\psi L^\dagger dW_t^2 \\ &\quad - \frac{1}{2}kL\rho_\psi dW_t^2 + \frac{1}{4}k^2\rho_\psi dW_t^2 + \left(L - \frac{1}{2}k\right)\rho_\psi dW_t + \left(L^\dagger - \frac{1}{2}k\right)\rho_\psi dW_t \\ &= -\frac{1}{2}L^\dagger L\rho_\psi dt - \frac{1}{2}\rho_\psi L^\dagger L dt + \left(A dt - \frac{1}{2}kL dW_t^2\right)\rho_\psi + \rho_\psi \left(A^\dagger dt - \frac{1}{2}kL^\dagger dW_t^2\right) + \frac{1}{4}k^2\rho_\psi dW_t^2 \\ &\quad + \left(L + L^\dagger - k\right)\rho_\psi dW_t \end{aligned}$$

Donc la condition nécessaire et suffisante pour retrouver l'équation de Lindblad en moyenne est d'avoir :

$$\begin{aligned} A - \frac{1}{2}kL &= -\frac{1}{8}k^2, \\ A &= \frac{1}{2}kL - \frac{1}{8}k^2. \end{aligned}$$

avec k quelconque. En particulier pour $k = 0$ on retrouve l'équation naïve et pour $k = \langle L + L^\dagger \rangle_\psi$ on retrouve l'équation corrigée donc elles sont toutes deux consistantes avec Lindblad.

Conservation en moyenne de la norme

On peut également montrer que l'EDS obtenue par substitution :

$$d\psi(t) = \frac{1}{2}(kL - L^\dagger L - \frac{1}{4}k^2)\psi dt + \left(L - \frac{1}{2}k\right)dW_t$$

ne fait pas dériver la norme de ψ en moyenne. Dans la suite on notera $l = 2\psi^\dagger L\psi = 2\psi^\dagger L^\dagger\psi = \psi^\dagger(L + L^\dagger)\psi = \langle L + L^\dagger \rangle_\psi$.

$$\begin{aligned} d\|\psi\|^2 &= d\psi^\dagger\psi + \psi^\dagger d\psi + d\psi^\dagger d\psi \\ &= \frac{1}{2}\psi^\dagger \left(kL - L^\dagger L - \frac{1}{4}k^2\right)\psi dt + \frac{1}{2}\psi^\dagger \left(kL^\dagger - L^\dagger L - \frac{1}{4}k^2\right)\psi dt \\ &\quad + \psi^\dagger \left(L^\dagger - \frac{1}{2}k\right) \left(L - \frac{1}{2}k\right)\psi dW_t^2 + \psi^\dagger \left(L^\dagger - \frac{1}{2}k\right)\psi dW_t + \psi^\dagger \left(L - \frac{1}{2}k\right)\psi dW_t \\ &= \left(\|L\psi\|^2 + \frac{1}{4}k^2\|\psi\|^2 - \frac{1}{2}kl\right)(dW_t^2 - dt) + (l - k\|\psi\|^2)dW_t \end{aligned}$$

Ainsi $\frac{d}{dt}\mathbb{E}[\|\psi\|^2] = 0$ pour toute valeur de k , et donc en particulier pour $k = 0$ et $k = l = \langle L + L^\dagger \rangle_\psi$. Cette EDS conserve donc la norme en moyenne, mais on remarque que le terme de diffusion est non nul.

Minimisation de la variance

Nous venons de voir que l'EDS considérée est consistante avec Lindblad et préserve la norme pour toute valeur de $k \in \mathbb{R}$. Il s'agit à présent d'optimiser ce paramètre pour minimiser la variance. La variance du projecteur, de la norme, ou de l'état lui-même sur un pas de temps est donné par le terme en dW_t car la variance de dW_t^2 est d'ordre 2 en dt . Calculons ces trois variances, en reprenant les termes en dW_t des calculs précédents.

Les variances du projecteur, de la norme et de ψ sont :

$$\begin{aligned} \text{Var}(d\rho) &= \|(L + L^\dagger - k)\rho\|^2 \\ &= \text{Tr}(\psi\psi^\dagger(L + L^\dagger - k)^2\psi\psi^\dagger) \\ &= 2\|L\psi\|^2\|\psi\|^2 + \frac{1}{2}l^2 - 2kl\|\psi\|^2 + k^2\|\psi\|^2, \\ \text{Var}(d\|\psi\|^2) &= (l - k\|\psi\|^2)^2, \\ \text{Var}(d\psi) &= \|L\psi - \frac{1}{2}k\psi\|^2 = \|L\psi\|^2 - \frac{1}{2}kl + \frac{1}{4}k^2\|\psi\|^2. \end{aligned}$$

Sous l'hypothèse $\|\psi\| = 1$ ces trois variances sont minimales pour $k = l = \langle L + L^\dagger \rangle_\psi$, ce qui correspond au processus de Wiener corrigé introduit (cf 2.2.2). Cela explique le fait que la matrice densité calculée par Monte-Carlo à partir de cette EDS converge bien plus vite lorsqu'on augmente le nombre M de répliques, comme on l'a observé numériquement.

A.3 Processus de Wiener rang réduit

Conservation de la norme

Montrons que l'EDS :

$$d\nu(t) = U^\dagger D_1^0(\psi) dt + U^\dagger D_2(\psi) dW + \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho_{LR}L^\dagger)}{2m} \sigma^{-1} U^\dagger \psi dt$$

avec le terme de dérive :

$$D_1^0(\psi) = \frac{1}{2} \left(\langle L + L^\dagger \rangle_\psi L - L^\dagger L - \frac{1}{4} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 \right) \psi$$

et le terme de diffusion :

$$D_2(\psi) = \left(L - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \right) \psi$$

conserve la norme en espérance. Ceci est équivalent à la conservation de la norme de $\psi = U\nu$.

$$\begin{aligned}
d\|\nu\|^2 &= d\nu^\dagger\nu + \nu^\dagger d\nu + d\nu^\dagger d\nu \\
&= \frac{1}{2}\nu^\dagger U^\dagger \left(\langle L + L^\dagger \rangle_\psi L - L^\dagger L - \frac{1}{4} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 \right) U\nu dt \\
&\quad + \frac{1}{2}\nu^\dagger U^\dagger \left(\langle L + L^\dagger \rangle_\psi L^\dagger - L^\dagger L - \frac{1}{4} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 \right) U\nu dt \\
&\quad + \nu^\dagger U^\dagger \left(L^\dagger - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \right) P \left(L - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \right) U\nu dW_t^2 \\
&\quad + \nu^\dagger U^\dagger \left(L^\dagger - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \right) U\nu dW_t + \nu^\dagger U^\dagger \left(L - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \right) U\nu dW_t \\
&\quad + \nu^\dagger \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho_{\text{LR}}L^\dagger)}{m} \sigma^{-1}\nu dt \\
&= \left[-\|L\psi\|^2 + \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 + \frac{1}{4} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 \|\psi\|^2 \right] dt \\
&\quad + \left[\|U^\dagger L\psi\|^2 - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 - \frac{1}{4} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 \|\psi\|^2 \right] dW_t^2 \\
&\quad + \nu^\dagger \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho_{\text{LR}}L^\dagger)}{m} \sigma^{-1}\nu dt
\end{aligned}$$

Or par définition de la matrice densité son action contre une observable peut s'écrire comme une espérance sur des états aléatoires ψ dont la loi est donnée par ρ :

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_{\rho_{\text{LR}}} [\|L\psi\|^2 - \|U^\dagger L\psi\|^2] &= \mathbb{E}_{\rho_{\text{LR}}} [\psi^\dagger L^\dagger (\mathbb{I}_n - P)L\psi] = \text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho_{\text{LR}}L^\dagger), \\
\mathbb{E}_\sigma [\nu^\dagger \sigma^{-1}\nu] &= \text{Tr}(\sigma^{-1}\sigma) = m
\end{aligned}$$

Ainsi, si l'on suppose que les ψ sont distribués selon ρ_{LR} (*ie.* que les ν sont distribués selon σ) alors on obtient :

$$\mathbb{E}_{\rho_{\text{LR}}} [d\|\nu\|^2] = -\mathbb{E}_{\rho_{\text{LR}}} [\|L\psi\|^2 - \|U^\dagger L\psi\|^2] dt + \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho_{\text{LR}}L^\dagger)}{m} \mathbb{E}_\sigma [\nu^\dagger \sigma^{-1}\nu] = 0$$

Cela prouve que si les ν suivent la bonne distribution ρ_{LR} alors leur norme est conservée en moyenne.

Consistance avec Lindblad réduit

Il suffit de vérifier que l'on vérifie la condition (29) obtenue dans la Section 3.1.3 en prenant les expressions :

$$\begin{aligned}
A\psi &= U^\dagger D_1^0(\psi) + \frac{\text{Tr}((\mathbb{I}_n - P)L\rho L^\dagger)}{2m} \sigma^{-1} U^\dagger \psi, \\
B &= U^\dagger D_2(\psi).
\end{aligned}$$

On substitue et on calcule :

$$\begin{aligned}
& - \frac{\text{Tr}(L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P))}{m} P + \left(\frac{1}{2} PL^\dagger L + UA \right) \rho + \rho \left(\frac{1}{2} L^\dagger LP + A^\dagger U^\dagger \right) - PL\rho L^\dagger P + UBB^\dagger U^\dagger \\
& = - \frac{\text{Tr}(L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P))}{m} P \\
& + \left(\frac{1}{2} PL^\dagger L + \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi PL - \frac{1}{2} PL^\dagger L - \frac{1}{8} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 P + \frac{\text{Tr}(L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P))}{2m} U\sigma^{-1}U^\dagger \right) \rho \\
& + \rho \left(\frac{1}{2} L^\dagger LP + \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi L^\dagger P - \frac{1}{2} L^\dagger LP - \frac{1}{8} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 P + \frac{\text{Tr}(L\rho L^\dagger(\mathbb{I}_n - P))}{2m} U\sigma^{-1}U^\dagger \right) \\
& - PL\rho L^\dagger P + UU^\dagger \left(L - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \right) \rho \left(L^\dagger - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \right) UU^\dagger \\
& = \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi PL\rho - \frac{1}{8} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 \rho + \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \rho L^\dagger P - \frac{1}{8} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 \rho \\
& - PL\rho L^\dagger P + PL\rho L^\dagger P - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi \rho L^\dagger P - \frac{1}{2} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi PL\rho + \frac{1}{4} \langle L + L^\dagger \rangle_\psi^2 \rho \\
& = 0.
\end{aligned}$$