Equations de Schrödinger stochastiques

Clément Pellegrini

Université Claude Bernard Lyon1

Institut Camille Jordan

pelleg@math.univ-lyon1.fr

1) Trajectoires quantiques discrètes

Interaction simple

On considère un petit système $\mathcal{H}_0 \simeq \mathbb{C}^N$ équipé d'un état ρ en contact avec une copie de la chaîne $\mathcal{H}$ munit de l'état β

Le système couplé : $(\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}\,,\ \rho \otimes \beta)$

L'interaction est décrite par un unitaire

$$U = \exp(ihH_{tot})$$

Nouvel état après interaction : $U(\rho \otimes \beta)U^\star$

Mesure indirecte sur $\mathcal{H}$

Soit $A = \sum_{i=0}^{p} \lambda_i P_i$ une observable de $\mathcal{H}$ et $I \otimes A$ son prolongement sur $\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}$.

On observe λ_i avec probabilité

$$P[\text{observer } \lambda_i] = Tr[U(\rho \otimes \beta)U^\star \; I \otimes P_i]$$

Phénomène de réduction du paquet d'onde, après observation de λ_i, le nouvel état sur $\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}$ est

$$\tilde{\rho}_i^1 = \frac{I \otimes P_i \; U(\rho \otimes \beta)U^\star \; I \otimes P_i}{Tr[U(\rho \otimes \beta)U^\star \; I \otimes P_i]}$$

Nouvel état sur $\mathcal{H}_0$:

$$\rho_i^1 = \mathbf{E}_0 \left[\tilde{\rho}_i^1 \right],$$

où $\mathbf{E}_0$ désigne la trace partielle sur $\mathcal{H}_0$ par rapport à $\mathcal{H}$

Trajectoires quantiques sur la chaîne infinie

Comme la chaîne est supposée infinie, l'espace d'état est décrit par

$$\mathbf{\Gamma} = \mathcal{H}_0 \otimes \bigotimes_{k=1}^{\infty} \mathcal{H}_k\,,\ \ \mathcal{H}_k \simeq \mathcal{H}$$

munit de l'état

$$\mu = \rho \bigotimes_{k=1}^{\infty} \beta_k\,,\ \ \beta_k \simeq \beta$$

L'interaction numéro k est décrite par un unitaire U_k qui agit sur $\mathcal{H}_0$ tenseur $\mathcal{H}_k$ comme l'opérateur U et l'identité ailleurs.

Les interactions répétées sont donc décrites par

$$\left\{ \begin{array}{ccc} V_{k+1} & = & U_{k+1}V_k \\ V_0 & = & I \end{array} \right. \tag{1}$$

L'état μ après k interactions est donc

$$\mu_k = V_k \mu V_k^{\star}$$

Mesure au site k

Soit $A = \sum_{i=0}^{p} \lambda_i P_i$ une observable de $\mathcal{H}_k$ et

$$A^{(k)} = I \otimes \bigotimes_{i=1}^{k-1} I \otimes A \otimes \bigotimes_{j \geq k+1}^{\infty} I,$$

son prolongement sur $\mathbf{\Gamma}$, on note $P_i^{(k)}$ les prolongements des opérateurs P_i.

Si α est un état sur $\mathbf{\Gamma}$ alors

$$P[\text{observer } \lambda_i] = Tr\left[\alpha \; P_i^{(k)}\right]$$

Mesures répétées

L'espace de probabilité décrivant la suite de mesures est donc $\Sigma^{\mathbb{N}^\star}$ avec $\Sigma = \{0, \ldots, p\}$, les indices des valeurs propres de A.

On munit $\Sigma^{\mathbb{N}^\star}$ de la tribu cylindrique $\mathcal{C}$ engendrée par les cylindres

$$\Lambda_{i_1,\ldots,i_k} = \{\omega \in \Sigma^{\mathbb{N}^\star} / \omega_1 = i_1, \ldots \omega_k = i_k\}$$

On définit alors l'opérateur

$$\begin{aligned} & \tilde{\mu}_k(i_1, \ldots, i_k) \\ = \; & I \otimes P_{i_1} \otimes \ldots P_{i_k} \otimes \ldots \mu_k I \otimes P_{i_1} \otimes \ldots P_{i_k} \otimes \ldots \\ = \; & P_{i_k}^{(k)} \ldots P_{i_1}^{(1)} \mu_k P_{i_1}^{(1)} \ldots P_{i_k}^{(k)}. \end{aligned} \tag{2}$$

C'est l'état non-normalisé obtenu si on avait observé les valeurs propres $\lambda_{i_1}, \ldots, \lambda_{i_k}$. On pose alors

$$\begin{aligned} P[\Lambda_{i_1,\ldots,i_k}] &= P\Big[\text{observer } \lambda_{i_1}, \ldots, \lambda_{i_k}\Big] \\ &= Tr\Big[\tilde{\mu}_k(i_1, \ldots, i_k)\Big]. \end{aligned}$$

Grâce au théorème de consistence de Kolmogorov cela définit une unique mesure de probabilité sur $\Sigma^{\mathbb{N}^\star}$ munit de la tribu $\mathcal{C}$.

On définit alors la trajectoire quantique discrète $\tilde{\rho}_k$ sur $\mathbf{\Gamma}$.

$$\begin{array}{rccc} \tilde{\rho}_k : & \Sigma^{\mathbb{N}^\star} & \longrightarrow & \mathcal{B}(\mathbf{\Gamma}) \\ & \omega & \longmapsto & \frac{\tilde{\mu}_k(\omega_1,\ldots,\omega_k)}{Tr[\tilde{\mu}_k(\omega_1,\ldots,\omega_k)]} \end{array}$$

<u>Trajectoires quantiques sur $\mathcal{H}_0$</u>

On pose pour tout $\omega \in \Sigma^{\mathbb{N}^\star}$ et pour tout $k \in \mathbb{N}^\star$

$$\rho_k(\omega) = \mathbf{E}_0[\tilde{\rho}_k(\omega)].$$

Ici $\mathbf{E}_0$ désigne la trace partielle par rapport à toute la chaîne.

Proposition 1 *La trajectoire quantique discrète* (ρ_k) *est une chaîne de Markov sur* $(\Sigma^{\mathbb{N}^\star}, \mathcal{C}, P)$ *à valeur dans les états de* $\mathcal{H}_0$*.*

De manière plus précise si $\rho_k = \theta_k$ *où* θ_k *est un état sur* $\mathcal{H}_0$*, alors l'état aléatoire* ρ_{k+1} *prend l'une des valeurs suivantes*

$$\frac{\mathcal{L}_i(\theta_k)}{Tr[\mathcal{L}_i(\theta_k)]}, \quad i = 0, \ldots, p \qquad (3)$$

avec $\mathcal{L}_i(\theta_k) = \mathbf{E}_0[I \otimes P_i U \ (\theta_k \otimes \beta) \ U^\star I \otimes P_i]$*.*

Chaque possibilité pour ρ_{k+1} *apparaît avec probabilité*

$$p_i(\theta_k) = Tr\Big[U \ (\theta_k \otimes \beta) \ U^\star I \otimes P_i\Big].$$

On a alors

$$\rho_{k+1} = \sum_{i=0}^{p} \frac{\mathcal{L}_i(\rho_k)}{Tr[\mathcal{L}_i(\rho_k)]} \mathbf{1}_i^{k+1} \ ,$$

où $\mathbf{1}_i^{k+1}(\omega) = \mathbf{1}_i(\omega_{k+1})$ pour tout $\omega \in \Sigma^{\mathbb{N}^\star}$.

Atome à deux niveaux cas $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H} = \mathbb{C}^2$

La trajectoire (ρ_k) satisfait

$$\rho_{k+1} = \frac{\mathcal{L}_0(\rho_k)}{p_0(\rho_k)} \mathbf{1}_0^{k+1} + \frac{\mathcal{L}_1(\rho_k)}{p_1(\rho_k)} \mathbf{1}_1^{k+1}$$

On pose alors $X_{k+1} = \frac{\mathbf{1}_1^{k+1} - p_1(\rho_k)}{\sqrt{p_0(\rho_k) p_1(\rho_k)}}$.

La famille $(\mathbf{1}, X_{k+1})$ forme une b.o.n de

$$L^2(\{0,1\}, p_0(\rho_k)\delta_0 + p_1(\rho_k)\delta_1).$$

Dans cette base la trajectoire quantique (ρ_k) satisfait

$$\rho_{k+1} = \mathcal{L}_0(\rho_k) + \mathcal{L}_1(\rho_k) + \\ \left(-\sqrt{\frac{p_1(\rho_k)}{p_0(\rho_k)}} \mathcal{L}_0(\rho_k) + \sqrt{\frac{p_0(\rho_k)}{p_1(\rho_k)}} \mathcal{L}_1(\rho_k) \right) X_{k+1}$$

Introduisons maintenant le temps d'interaction

Comportement asymptotique

Introduisons $h = 1/n$ le temps entre deux interactions successives. On rappelle que

$$\mathcal{L}_i(\rho_k) = \mathbf{E}_0[I \otimes P_i(U(n)(\rho \otimes \beta)U^\star(n))I \otimes P_i],$$

où $U(n) = \exp(i\frac{1}{n}H_{tot})$.

pour étudier le comportement asymptotique de la trajectoire (ρ_k) à partir du comportement asymptotique de $U(n)$, il faut expliciter $\mathcal{L}_i(\rho_k)$ en termes d'opérateurs sur $\mathcal{H}_0$. Pour cela on fixe une base $\{\Omega_0, \Omega_1\}$ de $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.

On choisit la base $\mathcal{B} = \{\Omega_0 \otimes \Omega_0, \Omega_1 \otimes \Omega_0, \Omega_0 \otimes \Omega_1, \Omega_1 \otimes \Omega_1\}$ pour le produit tensoriel $\mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}$.

On choisit l'état de référence du système caractéristique de la chaîne dans l'état vide :

$$\beta = |\Omega_0\rangle\langle\Omega_0|.$$

Dans la base $\mathcal{B}$, l'opérateur unitaire $U(n)$ s'écrit

$$U(n) = \begin{pmatrix} U_{00}(n) & U_{01}(n) \\ U_{10}(n) & U_{11}(n) \end{pmatrix} \tag{4}$$

où les $U_{ij}(n)$ sont des opérateurs sur $\mathcal{H}_0$.

Stéphane Attal et Yan Pautrat ont montré alors que les coefficients $U_{ij}(n)$ devaient satisfaire des asymptotiques précises pour que l'opérateur

$$V_{[nt]} = U_{[nt]} U_{[nt]-1} \dots U_1$$

converge vers un opérateur $\tilde{V}_t$. La famille $(\tilde{V}_t)$ satisfait une *équation de Langevin quantique* décrivant un modèle continu d'interaction entre $\mathcal{H}_0$ et un espace de Fock. Ici on pose donc

$$\begin{aligned} U_{00}(n) &= I + \frac{1}{n}\left(-iH_0 - \frac{1}{2}CC^\star\right) + \circ\left(\frac{1}{n}\right) \\ U_{10}(n) &= \frac{1}{\sqrt{n}}C + \circ\left(\frac{1}{n}\right) \end{aligned}$$

Les opérateurs $\mathcal{L}_i$ dépendent également des projecteurs de l'observable A, on obtient alors deux comportements asymptotiques différents suivant l'expression des projecteurs P_i dans la base $\mathcal{B}$.

Si l'observable $A = \lambda_0 P_0 + \lambda_1 P_1$ de $\mathcal{H}$ est diagonale dans $\{\Omega_0, \Omega_1\}$ alors on obtient le comportement asymptotique suivant

$$\begin{aligned}\rho_{k+1} &= \rho_k + \frac{1}{n}[\mathcal{L}(\rho_k) + \circ(1)] \\ &\quad + \left(\frac{Tr[\mathcal{J}(\rho_k)}{Tr[\mathcal{J}(\rho_k)]} - \rho_k\right)(\mathbf{1}_1^{k+1} - p_1(\rho_k))\end{aligned}$$

et les probabilités de transition satisfont

$$\begin{aligned}p_0(\rho_k) &= 1 - \frac{1}{n}Tr[\mathcal{J}(\rho_k)] + \circ\left(\frac{1}{n}\right) \\ P_1(\rho_k) &= \frac{1}{n}Tr[\mathcal{J}(\rho_k)] + \circ\left(\frac{1}{n}\right)\end{aligned}$$

Ici $\mathcal{L}(\rho) = -i[H, \rho] - \frac{1}{2}\{CC^\star, \rho\} + C\rho C^\star$ et $\mathcal{J}(\rho) = C\rho C^\star$.

Si l'observable $A = \lambda_0 P_0 + \lambda_1 P_1$ de $\mathcal{H}$ n'est pas diagonale dans $\{\Omega_0, \Omega_1\}$ alors on obtient le comportement asymptotique suivant

$$\rho_{k+1} = \rho_k + \frac{1}{n}[\mathcal{L}(\rho_k) + \circ(1)]$$
$$+\frac{1}{\sqrt{n}}\Big[C\rho_k + \rho_k C^\star - Tr[\rho_k(C + C^\star) + \circ(1)]\rho_k\Big]X_{k+1}$$

Ici les probabilités sont de la forme

$$\begin{aligned} p_0(\rho_k) &= \xi + \frac{1}{\sqrt{n}}\nu\Big[Tr[\rho_k(C + C^\star)] + \circ(1)\Big] \\ p_1(\rho_k) &= 1 - p_0(\rho_k) \end{aligned}$$

2) Trajectoires quantiques continues

Equations de Belavkin

A partir des descriptions asymptotiques précedentes on va obtenir les modèles limites des équations de *Belavkin* dites *"classiques"*. Dans la littérature, elles sont décrites par :

1. une équation de type diffusif

$$\begin{aligned} d\rho_t &= \mathcal{L}(\rho_t)dt \\ &\quad +\Big(C\rho_t + \rho_t C^\star - Tr[C\rho_t + \rho_t C^\star]\rho_t\Big)dW_t, \end{aligned}$$

   où (W_t) est un **mouvement brownien** standard

2. une équation de type saut

$$d\rho_t = L(\rho_t)dt + \left[\frac{\mathcal{J}(\rho_t)}{Tr[\mathcal{J}(\rho_t)]} - \rho_t\right](d\tilde{N}_t - Tr[\mathcal{J}(\rho_t)]dt),$$

   où $\tilde{N}_t$ est un **processus de comptage** d'intensité stochastique $t \to \int_0^t Tr[\mathcal{J}(\rho_s)]ds$

Les solutions de ces équations sont appelées des **trajectoires quantiques continues**.

Convergence cas diffusif

Dans le cas de l'observable non diagonale on peut définir

$$\begin{aligned}\rho_{[nt]} &= \rho_0 + \sum_{k=0}^{[nt]-1} \rho_{k+1} - \rho_k \\ &= \rho_0 + \sum_{k=0}^{[nt]-1} \frac{1}{n}[\mathcal{L}(\rho_k) + \circ(1)] \\ &\quad + \sum_{k=0}^{[nt]-1} \frac{1}{\sqrt{n}}[\mathcal{H}(\rho_k) + \circ(1)] X_{k+1},\end{aligned}$$

où $\mathcal{H}(\rho) = C\rho + \rho C^\star - Tr[\rho(C + C^\star)]\rho$. On définit alors

$$\begin{aligned}\rho_n(t) &= \rho_{[nt]}, \\ V_n(t) &= \frac{[nt]}{n},\ \ W_n(t) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=0}^{[nt]-1} X_{k+1}.\end{aligned}$$

Ainsi

$$\begin{aligned}\rho_n(t) &= \rho_0 + \int_0^t \mathcal{L}(\rho_n(s-)dV_n(s) \\ &\quad + \int_0^t \mathcal{H}(\rho_n(s-))dW_n(s) + \varepsilon_n(t)\end{aligned}$$

On a le théorème suivant

Theorem 1 *Les processus* $(W_n(t), V_n(t), \varepsilon_n(t))$ *converge en loi vers* $(W_t, V_t, 0)$ *où* (W_t) *est un mouvement brownien standard et* $V_t = t$ *pour tout* t.

De plus on a

$$\sup_n \mathbf{E}\Big[[W_n(t), W_n(t)]\Big] < \infty$$

Alors le processus $(\rho_n(t))$ *satisfaisant*

$$\begin{aligned}\rho_n(t) &= \rho_0 + \int_0^t \mathcal{L}(\rho_n(s-)dV_n(s) \\ &\quad + \int_0^t \mathcal{H}(\rho_n(s-))dW_n(s) + \varepsilon_n(t)\end{aligned}$$

converge en loi vers le processus (ρ_t) *unique solution de*

$$\rho_t = \rho_0 + \int_0^t \mathcal{L}(\rho_s)ds + \int_0^t \mathcal{H}(\rho_s)dW_s$$

Equation avec saut

Problème de définition : dans l'équation avec saut le processus $\tilde{N}_t$ dépend de la solution (ρ_t). En effet pour définir un processus de comptage, il faut pouvoir déterminer la distribution des sauts de ce processus. Or ici il est impossible de définir le processus $\tilde{N}_t$ sans définir la solution. De même pour pouvoir définir la solution (ρ_t) il est nécessaire de connaitre le processus qui dirige l'équation différentielle stochastique.

Definition 1 *Soit* $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{F}_t, P)$ *un espace de probabilité. Un processus* (ρ_t) *est solution de l'équation de Belavkin avec saut si il existe un processus de comptage* $(\tilde{N}_t)$ *d'intensité stochastique* $t \to \int_0^t Tr[\mathcal{J}(\rho_s)]ds$ *tel que*

$$\begin{aligned}\rho_t &= \rho_0 + \int_0^t \left[\mathcal{J}(\rho_s) + Tr[\mathcal{J}(\rho_s)]\rho_s - \mathcal{J}(\rho_s)\right]ds \\ &\quad + \int_0^t \left(\frac{\mathcal{J}(\rho_{s-})}{Tr[\mathcal{J}(\rho_{s-})]} - \rho_{s-}\right)d\tilde{N}_s \quad P\ p.s\end{aligned}$$

Formulation en terme de processus de Poisson

Soit $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ l'espace de probabilité d'un processus ponctuel de Poisson N sur $\mathbb{R}^2$. Le processus N est une distribution aléatoire de point sur $\mathbb{R}^2$ tel que pour tout borélien B

$$P[N(B) = k] = e^{(-\Lambda(B))}\frac{\Lambda(B)^k}{k!},$$

où Λ désigne la mesure de Lebesgue, on a $\mathbf{E}[N(B)] = \Lambda(B)$.

Le processus N permet de définir une mesure aléatoire de comptage $N(., ds, dx)$ sur $\mathbb{R}^2$, alors tout processus solution de

$$\rho_t = \rho_0 + \int_0^t \left[\mathcal{J}(\rho_s) + Tr[\mathcal{J}(\rho_s)]\rho_s - \mathcal{J}(\rho_s)\right] ds$$

$$+ \int_0^t \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{\mathcal{J}(\rho_{s-})}{Tr[\mathcal{J}(\rho_{s-})]} - \rho_{s-}\right) \mathbf{1}_{0<x<Tr[\mathcal{J}(\rho_{s-})]} N(ds, dx)$$

permet de définir le processus

$$\tilde{N}_t = \int_0^t \int_{\mathbb{R}} \mathbf{1}_{0<x<Tr[\mathcal{J}(\rho_{s-})]} N(ds, dx)$$

<u>Convergence</u> De même on définit dans le cas où l'observable A est diagonale

$$\rho_{[nt]} = \rho_0 + \sum_{k=0}^{[nt]-1} \rho_{k+1} - \rho_k$$

$$= \rho_0 + \sum_{k=0}^{[nt]-1} \frac{1}{n}\Big[\mathcal{L}(\rho_k) - \mathcal{J}(\rho_k) + Tr[\mathcal{J}(\rho_k) + \circ(1)]\rho_k\Big]$$

$$+ \sum_{k=0}^{[nt]-1} \left(\frac{\mathcal{J}(\rho_k)}{Tr[\mathcal{J}(\rho_k)]} - \rho_k + \circ(1)\right)\mathbf{1}_1^{k+1}$$

On définit alors

$$\begin{aligned} \rho_n(t) &= \rho_{[nt]} \\ V_n(t) &= \frac{[nt]}{n}, \;\; N_n(t) = \sum_{k=0}^{[nt]-1} \mathbf{1}_1^{k+1} \end{aligned}$$

De même, on peut écrire une équation discrète de la forme

$$\begin{aligned} \rho_n(t) &= \rho_0 + \int_0^t \mathcal{F}(\rho_n(s-))dV_n(s) \\ &\quad + \int_0^t \mathcal{Q}(\rho_n(s-)dN_n(s) + \varepsilon_n(t) \end{aligned}$$

Ici par exemple il n'est pas possible de montrer directement une convergence du type

$$N_n(t) \xrightarrow{\mathcal{L}} \tilde{N}_t$$

car cela entrainerait la convergence de l'intensité stochastique. Or on a :

$$\begin{aligned}\mathbf{E}[N_n(t)] &= \sum_{k=0}^{[nt]-1} \mathbf{E}\left[\mathbf{1}_1^{k+1}\right] = \sum_{k=0}^{[nt]-1} \frac{1}{n}\mathbf{E}\Big[Tr[\mathcal{J}(\rho_k)]\Big] \\ \xrightarrow{\mathcal{L}} & \int_0^t \mathbf{E}\Big[Tr[\mathcal{J}(\rho_s)]\Big]ds = \mathbf{E}[\tilde{N}_t]\end{aligned}$$

Cela nécessite la convergence de la trajectoire quantique discrète.

On ne peut pas appliquer un résultat similaire à celui du cas diffusif. De la même manière que construire le processus $(\tilde{N}_t)$ nécessite la construction simultanée de (ρ_t), ici la convergence de $(N_n(t))$ est indissociable de de celle de $(\rho_n(t))$.

Pour obtenir la convergence on utilise une méthode de couplage, c'est à dire que l'on réalise la trajectoire discrète $(\rho_n(t))$ dans l'espace du processus de Poisson N.

Construction de la première mesure

On part d'un état ρ_0, alors ρ_1 est définit par

$$\rho_1 = \frac{\mathcal{L}_0(\rho_0)}{Tr[\mathcal{L}_0(\rho_0)]}\mathbf{1}_0^1 + \frac{\mathcal{L}_1(\rho_1)}{Tr[\mathcal{L}_1(\rho_1)]}\mathbf{1}_1^1$$

La variable aléatoire $\mathbf{1}_1^1$ prend la valeur 1 avec probabilité $Tr[\mathcal{L}_1(\rho_0)]$ et 0 avec probabilité $Tr[\mathcal{L}_0(\rho_0)]$.

Soit N le processus de Poisson, on définit

$$\begin{aligned} G_n^0 &= \Big\{(x,y) \in \mathbb{R}^2 /\ 0 < x < \frac{1}{n}, \\ &\qquad 0 < y < -n \ln\Big(Tr[\mathcal{L}_0(\rho_0)]\Big)\Big\} \end{aligned}$$

Alors $\mathbf{1}_{N(G_n^0)>0}$ a même loi que $\mathbf{1}_1^1$ et de proche en proche on construit les variables aléatoires $\mathbf{1}_1^{k+1}$.

Theorem 2 *Le processus $(\rho_n(t))$ définit à partir d'une trajectoire quantique décrivant les mesures répétées d'une observable diagonale converge en loi vers la solution (ρ_t) de l'équation avec saut.*

La méthode de couplage permet de comparer les deux processus,il faut encore utilisé un processus intermédiaire qui consiste à appliqué un schéma d'Euler à l'equation de Belavkin avec saut.

Extensions

1. Bain de chaleur
2. Théorie du contrôle
3. Retour à l'équilibre
4. Dimension supérieure équations de saut-diffusion.