Introduction au domaine de Recherche

Introduction à la tomographie d'états quantiques. Maximum de vraisemblance et estimation Bayésienne

Besset Tanguy

Supervisé par Pierre Rouchon, au sein du groupe Quantic
INRIA-ENS-MinesParis

Table des matières

1 Tomographie d'états

Remarque : Dans tout ce rapport, $|\psi\rangle$ désigne un vecteur colonne, $\langle\varphi|$ un vecteur ligne, $\langle\varphi|\psi\rangle$ le produit scalaire des deux vecteurs et $|\psi\rangle\langle\varphi|$ une matrice carrée (de rang 1).

1.1 Introduction

Nous nous intéressons au problème général suivant ; étant donné un état quantique initial noté ρ_0 qui nous est inconnu, et un ensemble de mesures effectuées sur cet état, notée Y, on voudrait obtenir une estimation de l'état initial ρ_0. C'est cette opération de reconstruction d'un état à partir de mesures réalisés sur celui-ci que l'on appelle Tomographie.

Pour cela on va considérer pour notre estimation l'état maximisant la vraisemblance (max-likelihood) au sens suivant :

ρ_{ML} est l'état maximisant la vraisemblance si il vérifie

$$P(Y|\rho_{ML}) = \max P(Y|\rho)$$

. Comme les mesures Y ont été obtenues à partir de l'état ρ_0, on peut espérer que ρ_{ML} soit proche de ρ_0 lorsque l'on a fait un grand nombre de mesures. On va maintenant détailler plus précisément les objets que l'on utilise ainsi que le procédé.

1.1.1 Matrice densité

Cette sous section s'inspire de [2] section 2.4 et introduit le concept fondamental d'opérateur densité.

Le formalisme de la mécanique quantique peut s'écrire de manière équivalente en terme d'état vectoriel (vector state) ou d'opérateur densité. Regardons comme décrire en terme d'opérateur densité les opérations usuelles sur les vecteurs d'états.

Supposons qu'un système quantique soit dans une superposition d'états $|\psi_i\rangle$ avec probabilité p_i, alors l'opérateur densité (appelé matrice densité de manière équivalente) associé est :

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

Évolution du système : Supposons maintenant que l'évolution du système quantique soit décrite par un opérateur unitaire U, alors :

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \to^U \quad \sum_i p_i U |\psi_i\rangle \langle\psi_i| U^\dagger = U\rho U^\dagger$$

Mesure sur le système : Supposons que l'on effectue une mesure décrite par des opérateurs de mesures M_m, alors si l'état initial était $|\psi_i\rangle$, la probabilité de mesurer m est :

$$p(m|i) = \langle\psi_i| M_m^\dagger M_m |\psi_i\rangle = \mathrm{Tr}(M_m^\dagger M_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i|)$$

On obtiens ainsi :

$$\begin{aligned} p(m) &= \sum_i p(m|i) p_i = \sum_i p_i \, \mathrm{Tr}(M_m^\dagger M_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i|) \\ &= \mathrm{Tr}(M_m \rho M_m^\dagger) \end{aligned}$$

Après une mesure dont le résultat est m, si l'état initial était i, le système se trouve dans l'état :

$$|\psi_i^m\rangle = \frac{M_m |\psi_i\rangle}{\sqrt{\langle\psi_i| M_m^\dagger M_m |\psi_i\rangle}}$$

L'opérateur densité correspondant au système après une mesure dont le résultat est m, s'écrit :

$$\rho_m = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\mathrm{Tr}(M_m \rho M_m^\dagger)}$$

Théorème : Caractérisation des opérateurs densité

Un opérateur hermitien ρ est un opérateur densité associé à un certain ensemble $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ si et seulement si :

1. ρ est de trace 1
2. ρ est un opérateur positif

1.2 Trajectoire de mesure

Posons un cadre mathématiques au problème précédent.
Soit $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert complexe de dimension finie. On note $D_\mathcal{H}$ l'ensemble des matrices densité sur $\mathcal{H}$, c'est à dire l'ensemble des matrices hermitiennes positives de trace 1. Avec ces notations, il y a bijection entre l'ensemble des états quantiques et l'ensemble des matrices densités.

Soit $\rho(t)$, matrice densité représentant un état quantique au temps t. On effectue sur ρ une mesure, dont l'effet est décrit par une application K_y, où le y ici désigne le résultat de la mesure. K_y est l'application de Kraus partielle associée à la mesure y.

<u>Définition : Opérateur de Kraus</u>

On appelle opérateur de Kraus un ensemble d'opérateur $(K_y)_{y\in Y}$, où Y désigne l'ensemble des résultats possible de la mesure, qui vérifie :

1. $\forall y \in Y\ ,\ \exists M_1, \ldots, M_{n_y} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ tel que $K_y(\rho) = \displaystyle\sum_{l=1}^{n_y} M_l \rho M_l^\dagger$
2. $\displaystyle\sum_{y\in Y} \sum_{l=1}^{n_y} M_l^\dagger M_l = Id_H$

Le formalisme de la mécanique quantique permet d'énoncer les résultats suivants :

— La probabilité de mesurer y sachant ρ vaut : $P(y|\rho(t)) = Tr(K_y \rho(t))$

— Après la mesure, l'état devient $\rho(t+\Delta t) = \frac{K_y \rho(t)}{Tr(K_y \rho(t))}$

<u>Exemple : Mesure d'un système à deux niveaux (qubit)</u>

Considérons un système quantique à deux niveaux. Les deux états sont notés $|e\rangle$ pour "excited" et $|g\rangle$ pour "ground". Concrètement, ici $\mathcal{H}$ est $\mathbb{C}^2$, et $|e\rangle = (1,0)$; $|g\rangle = (0,1)$. (On notera par la suite ces états $|0\rangle$ et $|1\rangle$.) Si on considère maintenant la mesure de l'état du système, donné par l'opérateur $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, avec pour résultat 1, si le système est dans l'état excité, -1 sinon ; alors l'effet de cette mesure est décrite par les applications de Kraus partielles suivantes :

$$K_1 : \rho \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \rho \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$K_{-1} : \rho \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \rho \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Considérons maintenant que l'on effectue plusieurs mesures successives en partant de l'état $\rho_0 = \rho(t=0)$, qui est un état quantique quelconque. Au temps $k\Delta t$, que l'on notera juste k pour alléger les notations, le résultat de la mesure est y_k, donnée par l'application de Kraus partielle K_{k,y_k}. On note

Y l'ensemble des mesures ; $Y = \{y_1, \ldots, y_n\}$.
En définissant par récurrence les états ρ_k par :

$$\rho_k = \rho(k\Delta t) = \frac{K_{k,y_k}(\rho_{k-1})}{Tr(K_{k,y_k}(\rho_{k-1}))}$$

on peut alors calculer la probabilité de mesurer Y sachant ρ_0 (les mesures successives sont supposées indépendantes, donc la mesure au temps $k\Delta t$ dépend uniquement de l'état du système au temps k.) :

$$\begin{aligned} P(Y \mid \rho_0) &= \prod_{k=1}^{n} P(y_k \mid \rho_{k-1}) && (1) \\ &= Tr(K_{n,y_n} \circ \cdots \circ K_{1,y_1}\rho_0) && (2) \end{aligned}$$

On rappelle que l'on cherche l'état maximisant cette probabilité. On va voir dans la suite comment réécrire cette expression grâce au formalisme de l'adjoint.

1.2.1 États adjoints

On définit sur l'ensemble des matrices hermitiennes de $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ le produit scalaire suivant :

Pour A et B hermitiennes, $\langle A, B \rangle = Tr(AB)$.
On rappelle la définition de l'adjoint K^* d'un opérateur K :

$\forall A, B$ hermitiennes, $\langle A, K(B) \rangle = \langle K^*(A), B \rangle$.

On peut utiliser ceci pour réécrire le résultat de la section précédente :

$$P(Y \mid \rho_0) = \mathrm{Tr}(K^*_{1,y_1} \circ \cdots \circ K^*_{n,y_n}(Id_H) \cdot \rho_0)$$

Une vérifcation immédiate sur l'écriture des applications de Kraus partielle permet d'assurer que l'adjoint d'une application de Kraus partielle est aussi une application de Kraus partielle.

On définit les états adjoints de la façon suivante :

— $E_n = Id_H$

— pour tout $k \in [1, n]$, $E_{k-1} = \frac{K^*_{k,y_k}(E_k)}{Tr(K^*_{k,y_k}(E_k))}$

(Remarque : Les états adjoints $(E_i)_{i \leq n}$ sont alors des matrices densité.)

On obtient :

$$P(Y|\rho_0) = Tr(E_0\rho_0) \prod_{k=1}^{n} \mathrm{Tr}(K^*_{k,y_k}(E_k))$$

On obtient alors 2 parties dans l'expression de $P(Y|\rho_0)$, une dépendant de l'état initial, et l'autre dépendant uniquement des résultats des différentes mesures effectuées.

1.2.2 Loglikelyhood function

Considérons maintenant Ω trajectoires quantiques indépendantes, partant toutes du même état initial ρ_0. On appelle "trajectoire" une série de mesure réalisée sur un système quantique tel que détaillée dans les sections précédentes. On notera y_k^m la k-ième mesure effectuée sur la m-ième trajectoire, $K_{k,y_k^m}^m$ l'application de Kraus partielle associée, E_k^m l'état adjoint associé et Y^m l'ensemble des mesures de la m-ième trajectoire. (On supposera pour simplifier les notations avoir effectué le même nombre de mesures n sur chaque trajectoire.)

On obtient :

$$\begin{aligned} P(Y^1, \dots, Y^\Omega|\rho_0) &= \prod_{m=1}^{\Omega} P(Y^m|\rho_0) \\ &= \prod_{m=1}^{\Omega} \left(\mathrm{Tr}(E_0^m \rho_0) \prod_{k=1}^{n} \mathrm{Tr}(K_{k,y_k}^{m\,*}(E_k)) \right) \end{aligned}$$

<u>**Définiton**</u> Soit f, application de l'ensemble des matrices densité dans $\mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ définit par :

$$f : \rho \to \log\big(P(Y^1, \dots, Y^\Omega|\rho)\big) - \log\big(P(Y^1, \dots, Y^\Omega|Id_H)\big)$$

On appelle f la fonction de log-vraisemblance. f s'écrit :

$$f(\rho) = \sum_{m=1}^{\Omega} \log(\mathrm{Tr}(E_0^m \rho))$$

Le résultat qui suit provient de [3].
On se place dans le cas non dégénéré, c'est à dire que l'ensemble des matrices $Id_H, E_0^1, \dots, E_0^\Omega$ engendrent l'espace des matrices hermitiennes.

La Hessienne de f vérifie : Pour A,B matrices hermitiennes,

$$A \cdot Hess(f(\rho)) \cdot B = -\sum_{m=0}^{\Omega} \frac{Tr(AE_0^m)Tr(BE_0^m)}{Tr(\rho E_0^m)^2}$$

Ainsi dans le cas non dégénéré, la hessienne de f est une forme bilinéaire strictement négative, donc f est strictement concave.

f est alors strictement concave sur l'ensemble $D_{\mathcal{H}}$ des matrices densité. $D_{\mathcal{H}}$ est un convexe fermé borné, f possède donc un unique maximum sur $D_{\mathcal{H}}$. Ce maximum peut être caractérisé de façon unique par les conditions du premières ordres suivantes :

<u>Théorème :</u>

Dans un premier temps on ne suppose pas forcément être dans le cas non dégénéré.

Si ρ^* est un maximiseur de f sur $D_{\mathcal{H}}$, alors

— $f(\rho^*) > -\infty$ donc $\forall 1 \leq m \leq \Omega$, $Tr(E_0^m \rho^*) > 0$

— $[\rho^*, \nabla f(\rho^*)] = 0$, où $[\cdot, \cdot]$ désigne le commutateur.

— $\exists \lambda > 0$ tel que $\lambda P^* \leq \nabla f(\rho) \leq \lambda I_{\mathcal{H}}$, où P^* est le projecteur orthogonal sur l'image de ρ^*

De plus, si la famille des $(E_0^m)_{m \leq \Omega}$ engendre l'ensemble des matrices hermitiennes, alors ces conditions sont suffisantes et caractérisent un unique maximum.

La preuve est trouvable dans [3], annexe C.

1.3 Cas particulier, le qubit

Sphère de Bloch

On considère maintenant que l'état quantique que l'on veut estimer est celui d'un système à deux niveaux (qubit).

Considérons les trois opérateurs suivants, appelés matrices de Pauli :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Alors tout opérateur hermitien A s'écrit de manière unique :

$$A = \frac{\mathrm{Tr}(A) I_{\mathcal{H}} + x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z}{2} \quad x, y, z \in \mathbb{R}$$

Considérons maintenant $\rho = \frac{I_H + x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z}{2}$ matrice hermitienne de trace 1.

(x,y,z) sont appelés les coordonnées de ρ dans la shpère de Bloch. En effet, pour que ρ soit une matrice positive (et donc un opérateur densité), il est nécessaire et suffisant que $x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$. On peut alors mettre en bijection l'ensemble $D_{\mathcal{H}}$ des opérateurs densité et la boule unité de $\mathbb{R}^3$. C'est cette boule unité que l'on appelle sphère de Bloch.

<u>Remarque : Correspondance 'vector state' / opérateur densité</u>

— L'opérateur de coordonnées dans la sphère de Bloch $(1,0,0)$ correspond à l'état vectoriel $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$. En effet :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(\langle 0| + \langle 1|) &= \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1|) \\
&= \frac{1}{2}\left(\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\right) \\
&= \frac{I_{\mathcal{H}} + \sigma_x}{2}
\end{aligned}$$

— De même l'opérateur de coordonnées $(0,1,0)$ correspond à $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i\,|1\rangle)$

— Et $(0,0,1)$ correspond à $|0\rangle$, tandis que $(0,0,-1)$ correspond à $|1\rangle$.

Cette approche est très pratique puisqu'elle permet de donner une vision géométrique plus claire des objets que l'on manipule. Ainsi au lieu de considérer la variété des opérateurs hermitiens positifs de trace 1, on considérera la boule unité de $\mathbb{R}^3$. Regardons comment s'exprime le produit scalaire dans la sphère de Bloch.

Pour $\rho_1, \rho_2 \in D_{\mathcal{H}}$, de coordonnées (x_1, y_1, z_1) et (x_2, y_2, z_2) :

$$\begin{aligned}
< \rho_1, \rho_2 >= Tr(\rho_1 \cdot \rho_2) &= Tr\left(\frac{(I_{\mathcal{H}} + x_1\sigma_x + y_1\sigma_y + z_1\sigma_z)(I_{\mathcal{H}} + x_2\sigma_x + y_2\sigma_y + z_2\sigma_z)}{4}\right) \\
&= \frac{1 + x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2}{2} \\
&= \frac{1}{2}\left(1 + \begin{pmatrix}x_1\\ y_1\\ z_1\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}x_2\\ y_2\\ z_2\end{pmatrix}\right)
\end{aligned}$$

On a utilisé les résultats classiques sur les matrices de Pauli suivants :

— $\forall \xi = x, y, z,\ Tr(\sigma_\xi) = 0,\ \sigma_\xi^2 = Id_{\mathcal{H}}$

— $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z,\ \sigma_y\sigma_z = i\sigma_x,\ \sigma_z\sigma_x = i\sigma_y$

Remarque/Définition : Une matrice densité ρ représente un état pur (ie non superposé) si et seulement si $Tr(\rho^2) = 1$. Ceci correspond dans la sphère de Bloch à dire que les coordonnées de ρ sont sur la frontière de la sphère de Bloch.

Fonction log-vraisemblance pour le qubit

Pour $1 \leq m \leq \Omega$, on note (x^m, y^m, z^m) les coordonnées de E_0^m dans dans la sphère de Bloch.

On peut alors voir de façon équivalente f comme une fonction de la sphère de Bloch dans $\mathbb{R}$. Vu comme cela,

$$f(x, y, z) = \sum_{m=1}^{\Omega} \log \left(1 + \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x^m \\ y^m \\ z^m \end{pmatrix} \right) - \Omega \log(2) = f(\rho)$$

2 Estimation Bayésienne

On a définit dans la section précédente comment obtenir une approximation, noté par la suite ρ_{ML}, pour Max-Likelihood de l'état initial du système ρ_0. Cet état ρ_{ML} est celui qui maximise la fonction $\tilde{f}(\rho) = \log(P(Y \mid \rho_0 = \rho))$.

La fonction de log-vraisemblance f et ses variations sont "proportionnelles" à Ω, le nombre de mesures effectuées, c'est pourquoi on va considérer plutôt la fonction $\overline{f}$ définit par $\overline{f} = \frac{1}{\Omega} f$.

On définit ρ_{BM}, qui est l'état issu de l'estimation Bayésienne de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \rho_{BM} &= \frac{\int_{D_{\mathcal{H}}} \rho P(\rho_0 = \rho \mid Y) d\rho}{\int_{D_{\mathcal{H}}} P(\rho_0 = \rho \mid Y) d\rho} \\ &= \frac{\int_{D_{\mathcal{H}}} \rho \cdot e^{\left(\Omega \overline{f}(\rho)\right)} d\rho}{\int_{D_{\mathcal{H}}} e^{\left(\Omega \overline{f}(\rho)\right)} d\rho} \end{aligned}$$

où $D_{\mathcal{H}}$ est l'ensemble des matrices de densité.

Dans le cadre du qubit, les coordonnées (x_{BM}, y_{BM}, z_{BM}) de ρ_{BM} dans la sphère de Bloch, s'écrivent :

$$\begin{pmatrix} x_{BM} \\ y_{BM} \\ z_{BM} \end{pmatrix} = \frac{\displaystyle\int_{B^{\mathbb{R}^3}(0,1)} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} e^{\Omega \overline{f}(x,y,z)} dx dy dz}{\displaystyle\int_{B^{\mathbb{R}^3}(0,1)} e^{\Omega \overline{f}(x,y,z)} dx dy dz}$$

2.1 Motivation

<u>Définition 1 :</u> Entropie de Von Neumann [2]

Pour ρ un état quantique, représenté par une matrice densité, on définit son entropie de Von Neumann S par :

$$S(\rho) = -Tr(\rho \log \rho)$$

Ou, de manière équivalente, en notant λ_i les valeurs propre de ρ :

$$S(\rho) = -\sum_i \lambda_i \log \lambda_i$$

Définition 2 : Entropie relative

Pour ρ, σ deux matrices densités, on définit l'entropie relative de ρ par rapport à σ de la façon suivante :

$$S(\rho||\sigma) = \mathrm{Tr}(\rho \log \rho) - \mathrm{Tr}(\rho \log \sigma)$$

Que se passe-t-il au niveau de l'entropie lorsque qu'une matrice densité est de rang faible ?

Si l'une des valeurs propres est nulle, on utilise le fait que $\lim_{x\to 0^+}(x \log x) = 0$, pour poser "0 log(0)=0".

Lorsque l'on considère l'entropie relative, si la deuxième matrice densité, σ, est de rang faible, et que son espace propre associé à la valeur propre 0 n'est pas contenu dans le noyau de la première, ρ, on se retrouve alors avec $S(\rho||\sigma) = +\infty$.

Or l'estimation par maximum de vraisemblance peut renvoyer un état de rang faible, ce qui n'est pas contre pas possible avec l'estimation Bayésienne (toujours strictement à l'intérieur de la variété des matrices densités).

On propose ainsi dans la suite, de calculer le développement asymptotique de l'estimation Bayésienne lorsque le nombre de mesures effectuées Ω tend vers l'infini dans le cadre particulier du qubit.

2.2 Développement asymptotiques

Les preuves des résultats de cette partie, basé sur des développements asymptotiques d'intégrales de Laplace sont inspirées de [1]. Le calcul des termes correctifs d'ordre dominant ne se retrouve pas dans la littérature.

On suppose ici que la fonction de log-vraisemblance est strictement concave, c'est à dire que l'ensemble des mesures (E_0^m) engendrent l'ensemble des matrices hermitiennes, et qu'elle atteint son maximum en $\vec{q}_{ML} = (x_{ML}, y_{ML}, z_{ML})$ sur le bord de la shpère de Bloch.

2.2.1 Cas gradient nul

On note H la Hessienne de f en q_{ML}.

Théorème 1 :

En plus des hypothèses précédentes, on suppose $\vec{\nabla} f(q_{ML}) = 0$.

Alors, les coordonnées q_{BM} de ρ_{BM} dans la shpère de Bloch s'écrivent :

$$q_{BM} = \left(I_{\mathbb{R}^3} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} (-H)^{-1/2} \right) \cdot \begin{pmatrix} x_{ML} \\ y_{ML} \\ z_{ML} \end{pmatrix} + O(\Omega^{-1})$$

Où le terme correctif $\sqrt{\frac{2}{\pi}} (-H)^{-1/2} \begin{pmatrix} x_{ML} \\ y_{ML} \\ z_{ML} \end{pmatrix}$ est en $O(\Omega^{-1/2})$.

L'ajout du terme correctif donne une vecteur strictement à l'intérieur de la sphère de Bloch, et donc représente un état quantique de rang maximal.

2.2.2 Cas gradient non nul

On a besoin d'introduire les notations suivantes :

Soit H la Hessienne de f en q_{ML}, $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$ les trois vecteurs de la base canonique de $\mathbb{R}^3$. Soit L changement de base orthonormée tel que :

— $L\vec{u}_x = \vec{q}_{ML}$

— $L^T H L = \begin{pmatrix} * & * & * \\ * & \lambda_1 & 0 \\ * & 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$

On note R la matrice diagonale de taille 2×2, $R = diag(|\lambda_1|^{-1/2}, |\lambda_2|^{-1/2})$.

Et enfin on note $\vec{h} = (h_1, h_2)$, vecteur de taille 2 avec :

$$h_1 = \frac{1}{4|\lambda_1|^{3/2}} \frac{d^3}{dt^3} [f(\vec{q}_{ML} + tL\vec{u}_y)]_{|t=0}$$
$$h_2 = \frac{1}{4|\lambda_2|^{3/2}} \frac{d^3}{dt^3} [f(\vec{q}_{ML} + tL\vec{u}_z)]_{|t=0}$$

Théorème 2 :

On reprend les hypothèses du début de la section. On suppose de plus que $\vec{\nabla} f(q_{ML}) \neq 0$.

Alors, les coordonnées de ρ_{BM} dans la shpère de Bloch sont :

$$q_{BM} = \begin{pmatrix} x_{ML} \\ y_{ML} \\ z_{ML} \end{pmatrix} + L \begin{pmatrix} -\frac{1}{\|\nabla f(q_{ML})\|} \\ R\vec{h} - \frac{R^2}{2\|\nabla f(q_{ML})\|} \cdot \begin{pmatrix} \vec{u}_x L^T H L \vec{u}_y \\ \vec{u}_x L^T H L \vec{u}_z \end{pmatrix} \end{pmatrix} + O(\Omega^{-2})$$

Ici le terme correctif est en $O(\Omega^{-1})$.

Comme pour la sous-section précédente, cette correction conduit également à un vecteur strictement à l'intérieur de la shpère de Bloch.

2.3 Forme matricielle

La forme sous laquelle on a pour l'instant écrit les résultats de cette section est très dépendante de la particularité de la représentation dans la sphère de Bloch. On va dans cette sous-section, écrire ces résultats sous une forme ne dépendant plus des coordonnées dans la sphère de Bloch, mais uniquement de la représentation sous la forme de matrice densité de l'état quantique.

On va considérer les notations suivantes :

— $D_{\mathcal{H}}$ l'ensemble des matrices densités.

— H_0 le sous espace vectoriel de $D_{\mathcal{H}}$, orthogonal à $Id_{\mathcal{H}}$. Autrement dit, H_0 est l'ensemble des matrices hermitiennes de trace nulle. On notera P_{H_0} le projecteur orthogonal sur ce sous espace.

— Pour ρ une matrice densité, on notera P_ρ le projecteur orthogonal sur le sous espace engendré par ρ, et $P_{\rho^\perp}$, le projecteur orthogonal sous l'orthogonal du sous espace engendré par ρ.

2.3.1 Cas gradient nul

Théorème 1.bis :

On reprend les hypothèses du théorème 1. (Ici H est une matrice carré de taille 4 et non plus 3.) Alors :

$$\rho_{BM} = \left(Id_{\mathcal{L}(\mathcal{H})} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} (P_{H_0} H P_{H_0})^{-1/2} \right)^{-1} \rho_{ML} + O(\Omega^{-1}) \tag{3}$$

Remarque 1 : L'inverse ici utilisé est l'inverse de Moore-Penrose.

Concrètement, ici on a : $P_{H_0} H P_{H_0} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{0} \\ \vec{0} & \tilde{H} \end{pmatrix}$.

Ainsi $(P_{H_0} H P_{H_0})^{-\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{0} \\ \vec{0} & \tilde{H}^{-\alpha} \end{pmatrix}$.

2.3.2 Cas gradient non nul

On reprend ici les hypothèses du théorème 2.

Théorème 2.bis :

Soit $\vec{d}$ le vecteur tel que, pour n'importe quelle base orthonormée de l'ensemble des matrices hermitiennes dans laquelle on se place $\vec{d} = \frac{1}{4}\tilde{H}^{-3/2}\vec{d^3 f}$, où $\vec{d^3 f}$ est le vecteur de taille 4 (matrice 2×2) tel que sa i-ème coordonnées est $\frac{\partial^3 f}{\partial \vec{u}_i^3}(\rho_{ML})$, et $\tilde{H}$ est la Hessienne de f dans cette base. Alors :

$$\rho_{BM} = \rho_{ML} - \frac{P_{H_0}\nabla f(\rho_{ML})}{\|P_{H_0}\nabla f(\rho_{ML})\|^2} + (P_{H_0}P_{\rho_{ML}^\perp}HP_{\rho_{ML}^\perp}P_{H_0})^{-1/2}\vec{d} - \frac{(P_{H_0}P_{\rho_{ML}^\perp}HP_{\rho_{ML}^\perp}P_{H_0})^{-1}}{2\|P_{H_0}\nabla f(\rho_{ML})\|} \cdot P_{\rho_{ML}^\perp}P_{H_0}HP_{H_0}\rho_{ML} + O(\Omega^{-2})$$

2.3.3 Remarque : Dimension supérieure

On a traité ici uniquement le cas d'un système à deux niveaux, le qubit. Les formules obtenues dans un premier temps utilisaient la particularité de l'écriture d'une matrice densité en fonction de ces coordonnées dans la sphère de Bloch et étaient donc forcément propres au cas du qubit.

Les résultats des théorèmes 1.bis et 2.bis sont en revanche sous une forme qui ne dépend pas de la structure de la sphère de Bloch. Les formules ont donc un sens en toute dimension et pas uniquement pour le cas du qubit.
Ces résultats trouvés dans ce cas particulier, mais avec une écriture sous une forme général laisse supposer qu'il est possible d'établir des formules de ce type en dimension supérieure. Ceci n'a pas pu être traité et laisse la voie à de futures recherches.

Références

[1] Norman Bleistein and Richard A. Handlesman. *Asymptotic expansions of integrals*, chapter 8. Dover publication, 1974.

[2] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information.* Cambridge University press, 2000.

[3] Pierre Six. *Estimation d'état et de paramètres pour les systèmes quantiques ouverts.* PhD thesis, Université Paris sciences et Lettres, 2016.