

# Dysolve

Mathis Beaudoin

Sessions d'hiver-été 2025

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Équations maîtres</b>	<b>1</b>
1.1	Équation de Schrödinger et opérateur d'évolution . . . . .	1
1.2	Système fermé et hamiltonien statique . . . . .	1
1.3	Système fermé et hamiltonien dynamique . . . . .	1
1.3.1	Les hamiltoniens commutent . . . . .	2
1.3.2	Les hamiltoniens ne commutent pas . . . . .	2
1.3.3	Écriture alternative . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Application à un drive oscillant</b>	<b>6</b>
2.1	Preliminaires . . . . .	6
2.2	Dérivation (partie 1) . . . . .	7
2.3	Dérivation (partie 2) . . . . .	7
2.4	Dérivation (partie 3) . . . . .	8
2.5	Dérivation (partie 4) . . . . .	8
2.6	Dérivation (dernière partie) . . . . .	9
2.7	Calcul de l'ordre 0 . . . . .	10
2.8	Calcul de l'ordre 1 . . . . .	10
2.9	Calcul de l'ordre $n$ . . . . .	12
2.9.1	Notation . . . . .	12
2.9.2	Formule pour l'ordre $n$ . . . . .	13
2.10	Reconstruire l'opérateur d'évolution . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Algorithme Dysolve</b>	<b>14</b>
	<b>Références</b>	<b>15</b>

# 1 Équations maîtres

## 1.1 Équation de Schrödinger et opérateur d'évolution

L'évolution temporelle d'un système quantique est décrit par la célèbre équation de Schrödinger où on pose ici  $\hbar = 1$  :

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

En définissant un opérateur d'évolution  $U(t, t_0)$  qui amène un état du temps  $t_0$  au temps  $t$ , c'est-à-dire que  $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$ , on peut l'injecter dans (1) afin d'avoir

$$i \frac{d}{dt} U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = H(t) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \implies i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) \quad (1.2)$$

Ici, la dérivée totale devient partielle par la règle de dérivation en chaîne pour les fonctions multivariées. Par ailleurs, il va de soi que  $U(t, t) = \mathbb{I}$  pour tout temps  $t$ , car il n'y a alors, selon notre définition, aucune évolution qui a lieu. Dans ce cas, comme rien ne se passe, il faut que l'opérateur d'évolution soit l'identité. Aussi, on peut décomposer une évolution  $U(t, t_0)$  en plusieurs évolutions une à la suite de l'autre de manière à avoir  $U(t, t_0) = U(t, t_1) U(t_1, t_0)$  par exemple. Il pourrait y en avoir autant qu'on veut.

## 1.2 Système fermé et hamiltonien statique

Pour un système fermé avec un hamiltonien statique (donc indépendant du temps), (1.2) devient

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \implies \int_{U(t_0, t_0)}^{U(t, t_0)} \frac{dU'}{U'} = -iH \int_{t_0}^t dt' \implies U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)} \quad (1.3)$$

## 1.3 Système fermé et hamiltonien dynamique

Sachant la forme de l'opérateur d'évolution lorsque l'hamiltonien est constant, on peut approximer l'opérateur d'évolution dans le cas où l'hamiltonien est dynamique. En effet, pour une variation infinitésimale de temps  $\delta t$ , l'hamiltonien change à peine de sa forme de départ et on peut le considérer comme étant constant sur ce petit intervalle. Lorsqu'on dit constant, on veut plutôt dire que l'hamiltonien est évalué à un point fixe à quelque part dans le petit intervalle de temps et ce pour toute la durée de ce fragment d'évolution. Ainsi,

$$U(t + \delta t, t) \approx e^{-iH(t)\delta t}$$

Ici, on évalue l'hamiltonien à  $t$ , car de toute manière  $\delta t \rightarrow 0$  ce qui en fait un choix pratique. Cependant, on aimerait avoir une forme explicite pour l'opérateur d'évolution sur une plus grande période de temps. On sait qu'on peut découper l'évolution, par exemple, en  $N$  sous-intervalles égaux de temps  $\epsilon = \frac{t-t_0}{N}$  pour que

$$U(t, t_0) = \prod_{k=1}^N U(t_0 + k\epsilon, t_0 + (k-1)\epsilon)$$

Dans la limite où  $\epsilon \rightarrow 0$  (donc où  $N \rightarrow \infty$ ), les sous-intervalles deviennent infiniment petits et dès lors on peut se dire avec la précédente approximation que

$$U(t_0 + k\epsilon, t_0 + (k-1)\epsilon) \approx e^{-i\epsilon H(t_0 + (k-1)\epsilon)}$$

Alors,

$$U(t, t_0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{k=1}^N U(t_0 + k\epsilon, t_0 + (k-1)\epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{k=1}^N e^{-i\epsilon H(t_0 + (k-1)\epsilon)}$$

On serait très tenté de combiner les exponentielles en sommant leur argument, mais on travaille avec des matrices et il faut alors faire attention. Effectivement, on peut combiner deux exponentielles contenant une matrice uniquement lorsque ces matrices commutent. Autrement, il faudrait utiliser la formule de Baker-Campbell-Hausdorff et personne ne veut avoir à l'utiliser. On distingue alors deux cas.

### 1.3.1 Les hamiltoniens commutent

D'abord, en supposant que tous les  $H(t_i)$  dans les exponentielles commutent entre eux, donc que  $[H(t_i), H(t_j)] = 0 \forall i, j$ , il est possible de combiner toutes les exponentielles de la manière suivante :

$$U(t, t_0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} e^{-i \sum_{k=0}^{N-1} H(t_0 + k\epsilon)\epsilon} = e^{-i \int_{t_0}^t H(t') dt'} \quad (1.4)$$

On voit clairement que si l'hamiltonien est constant, alors il peut être sorti de l'intégrale redonnant ainsi (1.3).

### 1.3.2 Les hamiltoniens ne commutent pas

On utilise ici une approche itérative. Depuis (1.2), on peut écrire

$$\int_{U(t_0, t_0)}^{U(t, t_0)} dU' = -i \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt' \implies U(t, t_0) = \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt'$$

Il ne s'agit pas d'une solution, car on trouve  $U(t, t_0)$  des deux côtés de l'équation. Par contre, avec ce fait, on peut remplacer l'équation dans elle-même en prenant soin de changer la notation un peu maladroite pour ce qu'on s'appête à faire.

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t H(t_1) U(t_1, t_0) dt_1 = \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t H(t_1) \left( \mathbb{I} - i \int_{t_0}^{t_1} H(t_2) U(t_2, t_0) dt_2 \right) dt_1 \\ &= \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 - \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} H(t_1) H(t_2) U(t_2, t_0) dt_2 dt_1 \end{aligned}$$

On répète le processus à l'infini afin d'obtenir

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n) dt_n \dots dt_2 dt_1$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n) dt_n \dots dt_2 dt_1 \quad (1.5)$$

ce qu'on appelle communément une série de Dyson. Par construction, les variables d'intégration respectent  $t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_n$  et il est aussi hautement non-trivial de montrer que (1.5) converge bien vers  $U(t, t_0)$ . De plus, la notation peut sembler être bizarre pour le terme  $n = 0$  et  $n = 1$  avec une borne d'intégration  $t_{-1}$  et une intégrale de  $t_0$  à  $t_0$  respectivement. En tant que tel, à cause de  $\int_{t_0}^{t_1} \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}}$ , on comprend implicitement que ça n'a de sens que pour  $n \geq 2$ . Pour le terme  $n = 0$  et  $n = 1$ , on fait un abus de notation pour les inclure et avoir une équation plus propre.

Il peut être difficile de voir comment (1.5) se réduit à (1.4) ou à (1.3) avec un changement approprié des conditions. On introduit alors l'opérateur de produit chronologique  $\mathcal{T}$  qui réordonne un produit matriciel de manière à ce que l'argument en temps des matrices dans le produit soit décroissant de la gauche vers la droite. Autrement dit,

$$\mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n)] = H(t_{i_1})H(t_{i_2})\dots H(t_{i_n}) \text{ où } t_{i_1} \geq t_{i_2} \geq \dots \geq t_{i_n} \quad (1.6)$$

Évidemment, si tous les hamiltoniens commutent entre eux, alors  $\mathcal{T}$  ne sert à rien. Pour clarifier l'utilisation de l'opérateur de produit chronologique, on revient à (1.5) en s'attardant à  $J_2$  l'intégrale du terme  $n = 2$  de la somme.

$$J_2 = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} H(t_1)H(t_2) dt_2 dt_1$$

Il est important de conserver le même ordre pour la multiplication matricielle, car par hypothèse les hamiltoniens ne commutent pas. Dans cette dernière équation, l'ordre d'intégration fait en sorte que  $t_1 \geq t_2$ , ce qu'on peut voir en représentant la région d'intégration (qui est la moitié de l'aire d'un carré de côté  $t$ , voir figure 1 (A)). Ainsi, on peut directement incorporer l'opérateur de produit chronologique dans  $J_2$ .

$$J_2 = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} H(t_1)H(t_2) dt_2 dt_1 = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)] dt_2 dt_1$$

Sans changer la valeur de  $J_2$ , on peut changer l'ordre d'intégration de la manière suivante :

$$J_2 = \int_{t_0}^t \int_{t_2}^t H(t_1)H(t_2) dt_1 dt_2$$

En représentant cette nouvelle région d'intégration, on voit qu'elle reste la même sauf que maintenant l'intégration se fait "horizontalement" au lieu de "verticalement" (voir figure 1 (B)). On peut ensuite procéder à un changement de variables (qui ne change toujours pas la valeur de  $J_2$ ) où  $t_1 \Leftrightarrow t_2$ .

$$J_2 = \int_{t_0}^t \int_{t_1}^t H(t_2)H(t_1) dt_2 dt_1$$

La région d'intégration fait alors une réflexion par rapport à l'axe de la droite  $t_1 = t_2$  et correspond alors à la moitié restante de l'aire du carré de côté  $t$  (voir figure 1 (C)). Dans ce cas,  $t_2 \geq t_1$  et on écrit

$$J_2 = \int_{t_0}^t \int_{t_1}^t H(t_2)H(t_1) dt_2 dt_1 = \int_{t_0}^t \int_{t_1}^t \mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)] dt_2 dt_1$$

Si on résume, on vient de trouver 2 formes différentes pour  $J_2$ .

$$J_2 = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)] dt_2 dt_1 = \int_{t_0}^t \int_{t_1}^t \mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)] dt_2 dt_1 \quad (1.7)$$

On remarque qu'en sommant ensemble chacune des formes, on peut avoir une formule pour  $J_2$  où les bornes d'intégration ne dépendent plus des  $t_i$ . On peut ensuite l'incorporer dans (1.5).

$$\begin{aligned} 2J_2 &= \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)] dt_2 dt_1 + \int_{t_0}^t \int_{t_1}^t \mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)] dt_2 dt_1 = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)] dt_2 dt_1 \\ \Rightarrow J_2 &= \frac{1}{2} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)] dt_2 dt_1 \end{aligned} \quad (1.8)$$

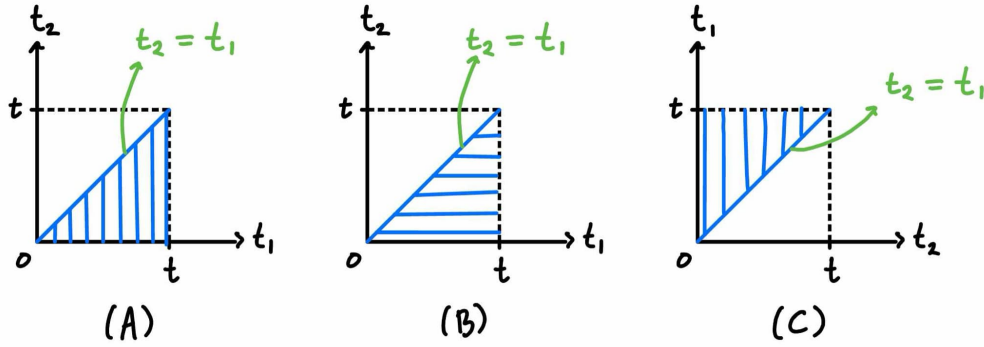


FIGURE 1 – Changements de la région d'intégration pour  $J_2$

En général, pour  $J_n$ , il existera  $n!$  façons différentes de l'écrire (pour les  $n!$  façons d'organiser les  $n$  hamiltoniens qui seront présents  $\rightarrow$  les  $n!$  changements de variables possibles). Par la suite, en sommant ces  $n!$  équations, toutes les dépendances sur les  $t_i$  partiront et la somme correspondra à  $n!J_n$ . Finalement, on isole  $J_n$  pour obtenir

$$J_n = \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \dots \int_{t_0}^t \mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n)] dt_n \dots dt_2 dt_1 \quad (1.9)$$

qu'on remplace dans (1.5) donnant ainsi

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \dots \int_{t_0}^t \mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n)] dt_n \dots dt_2 dt_1 \quad (1.10)$$

De là, si les hamiltoniens commutent (donc que  $\mathcal{T}$  ne fait rien), on voit qu'on peut retomber sur (1.4).

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \dots \int_{t_0}^t H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n) dt_n \dots dt_2 dt_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \left( \int_{t_0}^t H(t') dt' \right)^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -i \int_{t_0}^t H(t') dt' \right)^n = e^{-i \int_{t_0}^t H(t') dt'} \end{aligned}$$

Dans les ouvrages, (1.10) se note souvent

$$U(t, t_0) = \mathcal{T} e^{-i \int_{t_0}^t H(t') dt'} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \dots \int_{t_0}^t \mathcal{T} [H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n)] dt_n \dots dt_2 dt_1 \quad (1.11)$$

### 1.3.3 Écriture alternative

Il peut être parfois plus logique d'écrire (1.5) selon l'ordre d'application des hamiltoniens sur un état (ce que certains auteurs préfèrent). On veut dire par là qu'on aimerait avoir l'indice  $t_1$  pour l'hamiltonien le plus à droite,  $t_2$  pour celui à sa gauche et  $t_n$  pour l'hamiltonien le plus à gauche. Autrement dit, on veut renverser l'ordre d'écriture de (1.5). On part depuis

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t H(t_1) U(t_1, t_0) dt_1$$

Auparavant, en remplaçant l'équation dans elle-même, on aurait

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 - \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} H(t_1) H(t_2) U(t_2, t_0) dt_2 dt_1$$

Pour respecter la nouvelle notation, on a ici seulement besoin de renommer les variables du terme tout à droite.

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 - \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_2} H(t_2) H(t_1) U(t_1, t_0) dt_1 dt_2$$

En continuant le processus et en renommant les variables comme il faut, on obtient une forme générale pour cette notation alternative.

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_n} \dots \int_{t_0}^{t_2} H(t_n) \dots H(t_1) dt_1 \dots dt_{n-1} dt_n \quad (1.12)$$

## 2 Application à un drive oscillant

### 2.1 Préliminaires

Un drive est un laser qu'on envoie sur un transmon afin de manipuler son état. Contrairement à un pulse qui ne dure qu'un bref instant, un drive est appliqué plus longtemps de manière à avoir une rentrée d'énergie prolongée. Ici, le drive oscille et son application occasionne au transmon des changements de niveaux d'énergie. Le qubit évolue donc avec un hamiltonien dépendant du temps. Dans un tel contexte, ce dernier correspond à

$$H(t) = H_0 + V(t) \quad (2.1)$$

où, dans sa base d'états propres,  $H_0 = \sum_k \lambda_k |k\rangle \langle k|$  correspond aux énergies du transmon quand on le laisse tranquille et  $V(t) = X \cos(\omega t)$ , pour un opérateur quelconque  $X$ , correspond à la modification due au drive. En décomposant le cosinus en exponentielles complexes,

$$H(t) = H_0 + X \left( \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \right)$$

On s'attarde à l'opérateur d'évolution dans cette situation. Pour une variation infime de temps et en utilisant (2.1), on trouve (et ça fait peur)

$$\begin{aligned} U(t + \delta t, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_n} \dots \int_t^{t_2} H(t_n) \dots H(t_1) dt_1 \dots dt_n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_n} \dots \int_t^{t_2} (H_0 + V(t_n)) \dots (H_0 + V(t_1)) dt_1 \dots dt_n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_n} \dots \int_t^{t_2} (H_0 \dots H_0 + H_0 \dots H_0 V(t_1) + \dots + V(t_n) H_0 \dots H_0 + \dots + V(t_n) \dots V(t_1)) dt_1 \dots dt_n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_n} \dots \int_t^{t_2} (-i)^n H_0 \dots H_0 dt_1 \dots dt_n + \dots + \sum_{n=0}^{\infty} \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_n} \dots \int_t^{t_2} (-i)^n V(t_n) \dots V(t_1) dt_1 \dots dt_n \end{aligned} \quad (2.2)$$

On peut voir que la distribution des termes correspond à l'ensemble des combinaisons de  $n$  opérateurs où on choisit soit  $H_0$  ou  $V(t)$  pour chacun d'eux. Il y a donc au total  $2^n$  termes, chacun de  $n$  opérateurs et pouvant alterner entre des suites de  $H_0$  ou de  $V(t)$  de différentes longueurs. Graphiquement, on peut représenter la génération des combinaisons par la figure 2 où chacune d'entre elles correspond à une branche différente de l'arbre.

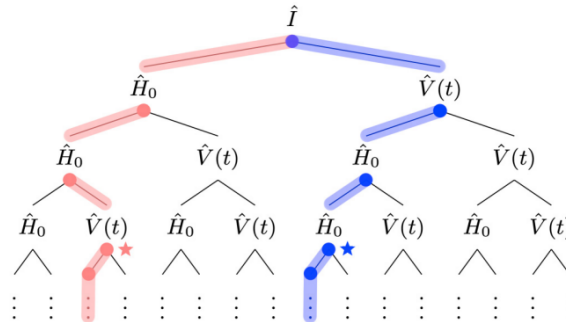


FIGURE 2 – Arbre permettant de générer l'ensemble des combinaisons



## 2.2 Dérivation (partie 1)

On considère maintenant  $n$  comme étant le nombre de  $V(t)$  présents dans chaque terme de (2.2) et on omet temporairement les indices  $V(t_j)$  pour éviter de se mélanger avec l'ancienne écriture. Il ne s'agit plus du même  $n$  que dans (2.2) et il faut alors un nouveau moyen d'écrire tout cela avec ce changement de variables. Pour se faire, on introduit les  $m_i$  qui indiquent combien d'applications de  $H_0$  il y a avant une application d'un  $V(t)$ . Par exemple,

$$\begin{aligned} H_0 V(t) H_0 H_0 &= (H_0)^1 V(t) (H_0)^2 = (H_0)^{m_1} V(t) (H_0)^{m_0} \implies m_0 = 2, m_1 = 1 \\ V(t) V(t) &= (H_0)^0 V(t) (H_0)^0 V(t) (H_0)^0 \implies m_0 = m_1 = m_2 = 0 \end{aligned}$$

En général, ils sont indexés de  $m_0$  à  $m_n$ , car pour un nombre  $n$  de  $V(t)$ , on peut avoir jusqu'à  $n+1$  blocs  $H_0 \dots H_0$  ayant des longueurs différentes.

$$\underline{H_0 H_0} V(t) : 1 \text{ bloc}, \underline{H_0} V(t) \underline{H_0} : 2 \text{ blocs}, V(t) \underline{H_0 H_0} : 1 \text{ bloc}$$

Cependant, chaque terme de (2.2) a une somme infinie. Ainsi, ces blocs peuvent être arbitrairement longs, faisant en sorte que les  $m_i$  peuvent prendre des valeurs entre 0 et l'infini. Il est plus concis de les mettre dans un vecteur  $\mathbf{m} = [m_n, \dots, m_0] \in \mathbb{Z}_+^{n+1}$ . Ainsi, on peut écrire toute chaîne d'opérateurs comme

$$(H_0)^{m_n} V(t) (H_0)^{m_{n-1}} V(t) \dots (H_0)^{m_1} V(t) (H_0)^{m_0} \quad (2.3)$$

dont on obtient sa longueur  $M$  (le nombre total d'opérateurs) grâce à

$$M = \left( \sum_{i=0}^n m_i \right) + n \quad (2.4)$$

## 2.3 Dérivation (partie 2)

La prochaine étape est maintenant de retrouver les indices dans les  $V(t)$  avec notre nouvelle notation. On sait déjà qu'il y aura  $n$  opérateurs  $V(t)$ , mais on doit pouvoir retrouver leur positionnement dans la chaîne d'opérateurs. On peut simplement compter combien il y a de  $H_0$  et d'autres  $V(t)$  avant celui qui nous intéresse. Par exemple, pour  $n = 2$ , on pourrait avoir la chaîne

$$H_0 V(t) H_0 V(t) H_0 \implies \mathbf{m} = [1, 1, 1]$$

Le premier  $V(t)$  s'applique nécessairement après  $m_0 = 1$  opérateur  $H_0$ . Le deuxième s'applique nécessairement après  $m_0 = 1$  opérateur  $H_0$ , un  $V(t)$  puis  $m_1 = 1$  opérateur  $H_0$ . Si  $p \in [1..n]$  est une variable qui passe au travers des  $n$  opérateurs  $V(t)$ , alors il est facile d'avoir l'indexage  $V(t_{l(p)})$  où

$$l(p) = \left( \sum_{j=0}^{p-1} m_j \right) + p \quad (2.5)$$

Pour reprendre l'exemple,

$$H_0 V(t_{l(2)}) H_0 V(t_{l(1)}) H_0 = H_0 V(t_{m_1+m_0+2}) H_0 V(t_{m_0+1}) H_0 = H_0 V(t_4) H_0 V(t_2) H_0$$

comme on aurait dans (2.2).

## 2.4 Dérivation (partie 3)

Ensuite, on étend les  $V(t_{l(p)})$  selon leur définition qu'on rappelle ici.

$$V(t_{l(p)}) = X \left( \frac{e^{i\omega t_{l(p)}} + e^{-i\omega t_{l(p)}}}{2} \right)$$

Toujours avec le même exemple,

$$\begin{aligned} H_0 V(t_4) H_0 V(t_2) H_0 &= \left( \frac{e^{i\omega t_4} + e^{-i\omega t_4}}{2} \right) \left( \frac{e^{i\omega t_2} + e^{-i\omega t_2}}{2} \right) H_0 X H_0 X H_0 \\ &= \frac{1}{2^2} (e^{i\omega t_2} e^{i\omega t_4} + e^{i\omega t_2} e^{-i\omega t_4} + e^{-i\omega t_2} e^{i\omega t_4} + e^{-i\omega t_2} e^{-i\omega t_4}) H_0 X H_0 X H_0 \end{aligned}$$

On introduit maintenant le vecteur à  $n$  dimensions  $\omega_n$  dont chacun de ses éléments peut soit être  $+\omega$  ou  $-\omega$ . On peut aller chercher l'élément  $i$  par  $\omega_n[i]$ . Pour un  $n$  donné, on voit qu'il en existe  $2^n$  différents qu'on rassemble dans  $\{\omega_n\}$ . Par exemple,

$$\{\omega_2\} = \{[+\omega, +\omega], [+ \omega, -\omega], [-\omega, +\omega], [-\omega, -\omega]\}$$

On peut alors réécrire

$$H_0 V(t_4) H_0 V(t_2) H_0 = \frac{1}{2^2} \sum_{\{\omega_2\}} \left( \prod_{p=1}^2 e^{i\omega_2[p]t_{l(p)}} H_0 X H_0 X H_0 \right)$$

Ainsi, pour une chaîne arbitraire, (2.3) peut être réécrit de la manière suivante.

$$\frac{1}{2^n} \sum_{\{\omega_n\}} \left( \prod_{p=1}^n e^{i\omega_n[p]t_{l(p)}} (H_0)^{m_n} X \dots X (H_0)^{m_0} \right) \quad (2.6)$$

## 2.5 Dérivation (partie 4)

Il est maintenant temps de remettre les précédentes parties dans le contexte de (2.2). On reconstruit partie par partie. D'abord, en ne considérant que les intégrales d'un seul terme, on se retrouve grâce à notre précédente trouvaille avec

$$\int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_M} \dots \int_t^{t_2} (-i)^M \left( \frac{1}{2^n} \sum_{\{\omega_n\}} \left( \prod_{p=1}^n e^{i\omega_n[p]t_{l(p)}} (H_0)^{m_n} X \dots X (H_0)^{m_0} \right) \right) dt_1 \dots dt_M$$

$$= \frac{1}{2^n} \sum_{\{\omega_n\}} \left( \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_M} \dots \int_t^{t_2} (-iH_0)^{m_n} X \dots X (-iH_0)^{m_0} \cdot (-i)^n \prod_{p=1}^n e^{i\omega_n[p]t_{l(p)}} dt_1 \dots dt_M \right)$$

Il y a ensuite une somme infinie pour chaque terme qu'on absorbe dans les différentes longueurs  $m_i$ . On doit donc ajouter

$$\frac{1}{2^n} \sum_{\{\omega_n\}} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}_+^{n+1}} \left( \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_M} \dots \int_t^{t_2} (-iH_0)^{m_n} X \dots X (-iH_0)^{m_0} \cdot (-i)^n \prod_{p=1}^n e^{i\omega_n[p]t_{l(p)}} dt_1 \dots dt_M \right)$$

Puis, on doit sommer la précédente équation pour tous les nombres  $n$  de  $V(t)$ .

$$U(t + \delta t, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{\omega_n\}} \frac{1}{2^n} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}_+^{n+1}} \left( \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_M} \dots \int_t^{t_2} (-iH_0)^{m_n} X \dots X (-iH_0)^{m_0} \cdot (-i)^n \prod_{p=1}^n e^{i\omega_n[p]t_{l(p)}} dt_1 \dots dt_M \right)$$

## 2.6 Dérivation (dernière partie)

Finalement, on procède simplement à un changement de variables  $t'_i = t_i - t$ . Ainsi,

$$\begin{aligned} dt'_i &= dt_i - dt = dt_i \\ t_i &= t'_i + t \\ t_i \in [t, t_j] &\implies t'_i \in [0, t'_j] \end{aligned}$$

nous donnent tout ce qu'il faut pour faire le changement de variables.

$$\begin{aligned} U(t + \delta t, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{\omega_n\}} \frac{1}{2^n} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}_+^{n+1}} \left( \int_0^{\delta t} \int_0^{t'_M} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_n} X \dots X (-iH_0)^{m_0} \cdot (-i)^n \prod_{p=1}^n e^{i\omega_n[p](t'_{l(p)} + t)} dt'_1 \dots dt'_M \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{\omega_n\}} \left( \prod_{p=1}^n e^{i\omega_n[p]t} \right) \frac{1}{2^n} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}_+^{n+1}} \left( \int_0^{\delta t} \int_0^{t'_M} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_n} X \dots X (-iH_0)^{m_0} \cdot (-i)^n \prod_{p=1}^n e^{i\omega_n[p]t'_{l(p)}} dt'_1 \dots dt'_M \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{\omega_n\}} e^{i \sum_{p=1}^n \omega_n[p]t} \frac{1}{2^n} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}_+^{n+1}} \left( \int_0^{\delta t} \int_0^{t'_M} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_n} X \dots X (-iH_0)^{m_0} \cdot (-i)^n \prod_{p=1}^n e^{i\omega_n[p]t'_{l(p)}} dt'_1 \dots dt'_M \right) \end{aligned}$$

Ce n'est pas très beau, alors on définit

$$S_{\mathbf{m}}^{(n)}(\omega_n, \delta t) = \int_0^{\delta t} \int_0^{t'_M} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_n} X \dots X (-iH_0)^{m_0} \cdot (-i)^n \prod_{p=1}^n e^{i\omega_n[p]t'_{l(p)}} dt'_1 \dots dt'_M \quad (2.7)$$

$$S^{(n)}(\omega_n, \delta t) = \frac{1}{2^n} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}_+^{n+1}} S_{\mathbf{m}}^{(n)}(\omega_n, \delta t) \quad (2.8)$$

$$U^{(n)}(t + \delta t, t) = \sum_{\{\omega_n\}} e^{i \sum_{p=1}^n \omega_n [p] t} S^{(n)}(\omega_n, \delta t) \quad (2.9)$$

de sorte que

$$U(t + \delta t, t) = \sum_{n=0}^{\infty} U^{(n)}(t + \delta t, t) \quad (2.10)$$

## 2.7 Calcul de l'ordre 0

On calcule explicitement l'ordre 0, soit  $U^{(0)}(t + \delta t, t)$  la branche la plus à gauche dans la figure 2 où la chaîne d'opérateurs ne contient que des  $H_0$ . Ici,  $\mathbf{m} = [m_0]$  et  $\{\omega_0\}$  est vide. Dès lors,

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{m}}^{(0)}(\omega_0, \delta t) &= \int_0^{\delta t} \int_0^{t'_{m_0}} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_0} dt'_1 \dots dt'_{m_0} = \frac{(-iH_0)^{m_0}}{m_0!} \int_0^{\delta t} \dots \int_0^{\delta t} dt'_1 \dots dt'_{m_0} = \frac{(-iH_0 \int_0^{\delta t} dt')^{m_0}}{m_0!} \\ &= \frac{(-iH_0 \delta t)^{m_0}}{m_0!} \end{aligned}$$

où on a utilisé le même truc qu'avec les  $J_n$  pour changer les bornes d'intégration. Par la suite,

$$S^{(0)}(\omega_0, \delta t) = \frac{1}{2^0} \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}_+^{0+1}} S_{\mathbf{m}}^{(0)}(\omega_0, \delta t) = \sum_{m_0=0}^{\infty} \frac{(-iH_0 \delta t)^{m_0}}{m_0!} = e^{-iH_0 \delta t}$$

Comme  $\{\omega_0\}$  est vide, on obtient finalement

$$U^{(0)}(t + \delta t, t) = e^{-iH_0 \delta t}$$

Le résultat a du sens, car on a seulement des opérateurs indépendants du temps. Donc, on s'attend à ce que l'opérateur d'évolution soit de la même forme que (1.3), ce qui est le cas. De manière équivalente, on peut aussi faire le précédent calcul avec la définition  $H_0 = \sum_k \lambda_k |k\rangle \langle k|$ . Ce qui suit est évident, car  $H_0$  est diagonal dans sa base d'états propres.

$$S^{(0)}(\omega_0, \delta t) = \sum_{m_0=0}^{\infty} \frac{(-iH_0 \delta t)^{m_0}}{m_0!} = \sum_{m_0=0}^{\infty} \frac{(-i \sum_k \lambda_k |k\rangle \langle k| \delta t)^{m_0}}{m_0!} = \sum_k \sum_{m_0=0}^{\infty} \frac{(-i \lambda_k \delta t)^{m_0}}{m_0!} |k\rangle \langle k| = \sum_k e^{-i \lambda_k \delta t} |k\rangle \langle k|$$

## 2.8 Calcul de l'ordre 1

On s'attarde ici aux branches avec un seul  $V(t)$  à quelque part dans la séquence d'opérateurs, ce qu'on calcule par  $U^{(1)}(t + \delta t, t)$ . On sait que  $\mathbf{m} = [m_1, m_0]$  et que  $\{\omega_1\} = \{[+\omega], [-\omega]\}$ . Ainsi,

$$S_{\mathbf{m}}^{(1)}(\omega_1, \delta t) = -i \int_0^{\delta t} \int_0^{t'_M} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_1} X(-iH_0)^{m_0} e^{i\omega_1[1]t'_{i(1)}} dt'_1 \dots dt'_M$$

$$= -i \int_0^{\delta t} \int_0^{t'_M} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_1} X(-iH_0)^{m_0} e^{i\omega_1[1]t'_{m_0+1}} dt'_1 \dots dt'_M$$

Sachant dans ce cas que  $M = m_0 + m_1 + 1 \implies m_0 + 1 = M - m_1$ ,

$$\begin{aligned} S_m^{(1)}(\omega_1, \delta t) &= -i(-iH_0)^{m_1} X \int_0^{\delta t} \int_0^{t'_M} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_0} e^{i\omega_1[1]t'_{M-m_1}} dt'_1 \dots dt'_M \\ &= -i(-iH_0)^{m_1} X \int_0^{\delta t} dt'_M \dots \int_0^{t'_{M-m_1+1}} e^{i\omega_1[1]t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} \int_0^{t'_{M-m_1}} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_0} dt'_1 \dots dt'_{M-m_1-1} \end{aligned}$$

De là,

$$\begin{aligned} S^{(1)}(\omega_1, \delta t) &= \\ \frac{1}{2} \sum_{m_1=0}^{\infty} \sum_{m_0=0}^{\infty} &\left( -i(-iH_0)^{m_1} X \int_0^{\delta t} dt'_M \dots \int_0^{t'_{M-m_1+1}} e^{i\omega_1[1]t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} \int_0^{t'_{M-m_1}} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_0} dt'_1 \dots dt'_{M-m_1-1} \right) \\ &= \frac{-i}{2} \sum_{m_1=0}^{\infty} (-iH_0)^{m_1} X \int_0^{\delta t} dt'_M \dots \int_0^{t'_{M-m_1+1}} e^{i\omega_1[1]t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} \sum_{m_0=0}^{\infty} \int_0^{t'_{M-m_1}} \dots \int_0^{t'_2} (-iH_0)^{m_0} dt'_1 \dots dt'_{M-m_1-1} \end{aligned}$$

On a déjà rencontré à l'ordre 0 ce qui se trouve à droite de la somme infinie sur  $m_0$ . Il y a en effet  $m_0$  intégrales à la droite de cette somme. Alors, on écrit

$$\begin{aligned} S^{(1)}(\omega_1, \delta t) &= \frac{-i}{2} \sum_{m_1=0}^{\infty} (-iH_0)^{m_1} X \int_0^{\delta t} dt'_M \dots \int_0^{t'_{M-m_1+1}} e^{i\omega_1[1]t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} S^{(0)}(\omega_0, t'_{M-m_1}) \\ &= \frac{-i}{2} \sum_{m_1=0}^{\infty} (-iH_0)^{m_1} X \int_0^{\delta t} dt'_M \dots \int_0^{t'_{M-m_1+1}} e^{i\omega_1[1]t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} \sum_{k'} e^{-i\lambda_{k'} t'_{M-m_1}} |k'\rangle \langle k'| \\ &= \frac{-i}{2} \sum_{k'} \sum_{m_1=0}^{\infty} (-iH_0)^{m_1} X \int_0^{\delta t} dt'_M \dots \int_0^{t'_{M-m_1+1}} e^{i(-\lambda_{k'} + \omega_1[1])t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} |k'\rangle \langle k'| \end{aligned} \quad (2.11)$$

On souhaite simplifier davantage en retrouvant encore l'équation d'ordre 0 pour y faire la même manipulation avec les  $H_0$  restants. Cependant, l'ordre des intégrales imbriquées nous ne permet de faire cela directement. Pour y remédier, on se rappelle des démarches pour  $J_2$  où on pouvait l'écrire de deux manières différentes, soit en intégrant "horizontalement" ou "verticalement" (voir figure 1 (A) et (B)). Ainsi, on pouvait inverser l'ordre d'intégration avec de nouvelles bornes appropriées. Cette façon de faire se généralise pour  $J_n$  mais tient aussi lorsqu'on intègre des fonctions au lieu de matrices. Pour les intégrales imbriquées de (2.11), on trouverait pour un tel changement

$$S^{(1)}(\omega_1, \delta t) = \frac{-i}{2} \sum_{k'} \sum_{m_1=0}^{\infty} (-iH_0)^{m_1} X \int_0^{\delta t} e^{i(-\lambda_{k'} + \omega_1[1])t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} \int_{t'_{M-m_1}}^{\delta t} dt'_{M-m_1+1} \dots \int_{t'_{M-1}}^{\delta t} dt'_M |k'\rangle \langle k'|$$

À droite de l'unique intégrale avec l'exponentielle, il y a exactement  $m_1$  intégrales. Alors,

$$S^{(1)}(\omega_1, \delta t) = \frac{-i}{2} \sum_{k'} \int_0^{\delta t} e^{i(-\lambda_{k'} + \omega_1[1])t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} \sum_{m_1=0}^{\infty} \int_{t'_{M-m_1}}^{\delta t} dt'_{M-m_1+1} \dots \int_{t'_{M-1}}^{\delta t} dt'_M (-iH_0)^{m_1} X |k'\rangle \langle k'|$$

Encore une fois, par les démarches pour  $J_n$ , on peut dire

$$\begin{aligned}
S^{(1)}(\omega_1, \delta t) &= \frac{-i}{2} \sum_{k'} \int_0^{\delta t} e^{i(-\lambda_{k'} + \omega_1[1])t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} \sum_{m_1=0}^{\infty} \frac{1}{m_1!} \left( \int_{t'_{M-m_1}}^{\delta t} dt'_{M-m_1+1} \right)^{m_1} (-iH_0)^{m_1} X |k'\rangle \langle k'| \\
&= \frac{-i}{2} \sum_{k'} \int_0^{\delta t} e^{i(-\lambda_{k'} + \omega_1[1])t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} \sum_{m_1=0}^{\infty} \frac{(-iH_0(\delta t - t'_{M-m_1}))^{m_1}}{m_1!} X |k'\rangle \langle k'| \\
&= \frac{-i}{2} \sum_{k'} \int_0^{\delta t} e^{i(-\lambda_{k'} + \omega_1[1])t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} e^{-iH_0(\delta t - t'_{M-m_1})} X |k'\rangle \langle k'| \\
&= \frac{-i}{2} \sum_{k'} \int_0^{\delta t} e^{i(-\lambda_{k'} + \omega_1[1])t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} \sum_k e^{-i\lambda_k(\delta t - t'_{M-m_1})} |k\rangle \langle k| X |k'\rangle \langle k'| \\
&= \frac{-i}{2} \sum_{k, k'} \int_0^{\delta t} e^{i(\lambda_k - \lambda_{k'} + \omega_1[1])t'_{M-m_1}} dt'_{M-m_1} e^{-i\lambda_k \delta t} \langle k| X |k'\rangle |k\rangle \langle k'| \\
&= \frac{-i}{2} \sum_{k, k'} \frac{1}{i(\lambda_k - \lambda_{k'} + \omega_1[1])} \left( e^{i\delta t(\lambda_k - \lambda_{k'} + \omega_1[1])} - 1 \right) e^{-i\lambda_k \delta t} \langle k| X |k'\rangle |k\rangle \langle k'| \\
&= \frac{-i}{2} \sum_{k, k'} \frac{1}{-i(\lambda_k - (\lambda_{k'} - \omega_1[1]))} \left( e^{-i\lambda_k \delta t} - e^{-i\delta t(\lambda_{k'} - \omega_1[1])} \right) \langle k| X |k'\rangle |k\rangle \langle k'| \\
&= \frac{-i\delta t}{2} \sum_{k, k'} \frac{i}{\lambda_k \delta t - (\lambda_{k'} - \omega_1[1])\delta t} \left( e^{-i\lambda_k \delta t} - e^{-i\delta t(\lambda_{k'} - \omega_1[1])} \right) \langle k| X |k'\rangle |k\rangle \langle k'| \\
&= \frac{-i\delta t}{2} \sum_{k, k'} f(\lambda_k \delta t, (\lambda_{k'} - \omega_1[1])\delta t) \langle k| X |k'\rangle |k\rangle \langle k'| \tag{2.12}
\end{aligned}$$

où on pose

$$f(\lambda_k \delta t, (\lambda_{k'} - \omega_1[1])\delta t) = \frac{i}{\lambda_k \delta t - (\lambda_{k'} - \omega_1[1])\delta t} \left( e^{-i\lambda_k \delta t} - e^{-i\delta t(\lambda_{k'} - \omega_1[1])} \right) \tag{2.13}$$

Finalement, le calcul de  $U^{(1)}(t + \delta t, t)$  se complète avec (2.9).

On remarque qu'autant pour  $S^{(0)}(\omega_0, \delta t)$  que  $S^{(1)}(\omega_1, \delta t)$ , ils ne dépendent pas du temps actuel  $t$  dans l'évolution, mais seulement de l'écart de temps  $\delta t$ . D'ailleurs, cette observation sera aussi vrai pour les ordres supérieurs.

## 2.9 Calcul de l'ordre $n$

### 2.9.1 Notation

Avant de donner une formule générale pour l'ordre  $n$ , on doit d'abord introduire quelques notations. Premièrement, il n'est pratique d'utiliser des apostrophes pour spécifier les  $n + 1$  sommes sur les états propres de  $H_0$ , car on aura de plus en plus de sommes et la notation sera horrible. Pour se faire, on introduit  $\mathbf{k}_n = (k^{(0)}, \dots, k^{(n)})$  qui sera un ensemble d'indices pour spécifier ces  $n + 1$  sommes sur les états propres.

Deuxièmement, on spécifiera les énergies propres de chacune des sommes par  $\lambda_n(\mathbf{k}_n) = (\lambda_{k^{(0)}}, \dots, \lambda_{k^{(n)}})$  où, pour préciser,  $H_0 |k^{(j)}\rangle = \lambda_{k^{(j)}} |k^{(j)}\rangle$ .

Troisièmement, on pose un "vecteur cumulatif" qui facilitera la généralisation.

$$\mathbf{c}(\boldsymbol{\omega}_n) = \left( \sum_{p=0}^{n-1} \omega_n[n-p], \sum_{p=0}^{n-2} \omega_n[n-p], \dots, \omega_n[n], 0 \right)$$

Finalement, lorsqu'on verra  $\sum_{\mathbf{k}_n}$ , on voudra dire  $\sum_{k^{(n)}} \sum_{k^{(n-1)}} \dots \sum_{k^{(0)}}$ .

### 2.9.2 Formule pour l'ordre $n$

Par récurrence et en s'inspirant des démarches pour l'ordre 0 et 1, on pourrait montrer que l'ordre  $n$  s'écrit

$$S^{(n)}(\boldsymbol{\omega}_n, \delta t) = \left( \frac{-i\delta t}{2} \right)^n \sum_{\mathbf{k}_n} f(\boldsymbol{\lambda}_n(\mathbf{k}_n)\delta t - \mathbf{c}(\boldsymbol{\omega}_n)\delta t) \langle k^{(n)} | X | k^{(n-1)} \rangle \dots \langle k^{(1)} | X | k^{(0)} \rangle | k^{(n)} \rangle \langle k^{(0)} |$$

Faisons sens de cela. Tout d'abord,  $(-i/2)^n$  provient simplement de (2.7) et (2.8) qu'on garde en facteur tout au long des calculs. Par la suite, les différents éléments de matrice  $\langle k^{(j+1)} | X | k^{(j)} \rangle$  de  $X$  avec le ket-bra  $| k^{(n)} \rangle \langle k^{(0)} |$  viennent des différentes exponentielles complexes contenant  $H_0$  qu'on réécrit de cette manière sachant que  $H_0$  est diagonal. C'est d'ailleurs pour cela qu'on doit faire une  $\sum_{\mathbf{k}_n}$ . Quant à  $(\delta t)^n$  et  $f(\boldsymbol{\lambda}_n(\mathbf{k}_n)\delta t - \mathbf{c}(\boldsymbol{\omega}_n)\delta t)$ , ils arrivent de la généralisation (qu'on ne détaillera pas, voir plutôt le paper) de (2.13). En fait, il existe une relation de récursion pour  $f$  où pour un vecteur  $\mathbf{a}$  de taille  $n$

$$f(\mathbf{a}) = i \frac{f(\mathbf{g}(\mathbf{a})) - f(\mathbf{g}^2(\mathbf{a}) \cup \mathbf{a}[n])}{\mathbf{a}[n-1] - \mathbf{a}[n]}$$

Ici,  $\mathbf{g}(\mathbf{a})$  retourne  $\mathbf{a}$  sans son dernier élément,  $\mathbf{g}^2(\mathbf{a}) = \mathbf{g}(\mathbf{g}(\mathbf{a}))$  et  $\cup$  ajoute un élément à un vecteur de sorte que  $\mathbf{a} = \mathbf{g}(\mathbf{a}) \cup \mathbf{a}[n]$ . Prendre la limite si jamais division par 0 au dénominateur.

## 2.10 Reconstruire l'opérateur d'évolution

Si on fait une évolution sur un temps  $T = P\delta t$  où  $P$  est un certain entier, alors

$$U(T, 0) = \mathcal{T} \prod_{p=0}^P U((p+1)\delta t, p\delta t) = \mathcal{T} \prod_{p=0}^P U_p = \mathcal{T} \prod_{p=0}^P \left( \sum_{n=0}^{\infty} U_p^{(n)} \right) \approx \mathcal{T} \prod_{p=0}^P \left( \sum_{r=0}^n U_p^{(r)} \right)$$

où on a tronqué la somme infinie. L'opérateur de produit chronologique ne fait qu'ordonner le produit de manière ascendante par rapport au temps de droite à gauche.

### 3 Algorithmes Dysolve



## Références