MEMOIRE DE MASTER

FILIÈRE : MATHÉMATIQUES FONDAMENTALES

THÈME

SCHÉMAS MONOTONES DISCRÉTISÉS EN TEMPS POUR L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

Présenté par :

Kenneth ASSOGBA
kennethassogba@gmail.com

Sous la direction de :

Prof. Julien SALOMON
UNIVERSITÉ PARIS-DAUPHINE

s

Année Universitaire : 2018-2019

Résumé & Abstract

Résumé

Les problèmes de contrôle optimal dans les systèmes quantiques suscitent un vif intérêt, aussi bien pour les questions fondamentales que pour les applications existantes et futures. Un problème important est le développement de méthodes de construction de contrôles pour les systèmes quantiques. Une des méthodes couramment utilisée est la méthode de Krotov initialement proposée dans un cadre plus général dans les articles de V.F. Krotov et I.N. Feldman (1978 [1], 1983 [2]). Cette méthode a été utilisée pour développer une nouvelle approche permettant de determiner des contrôles optimaux pour les systèmes quantiques dans [3] et dans de nombreux autres travaux de recherche : [4], [5] et [6] notamment. Leur mise en œuvre numérique repose sur des discrétisations liées à des développement limités. Cette approche entraîne cependant parfois des instabilités numériques. Nous presentons ici plusieurs méthodes de discrétisation temporelle qui permettent de résoudre ce problème en conservant au niveau discret la monotonie des schémas.

Mots-clés

contrôle quantique, schémas monotones convergents, methode de Krotov

Abstract

Mathematical problems of optimal control in quantum systems attract high interest in connection with fundamental questions and existing and prospective applications. An important problem is the development of methods for constructing controls for quantum systems. One of the commonly used methods is the Krotov method initially proposed beyond quantum control in the articles by V.F. Krotov and I.N. Feldman (1978 [1], 1983 [2]). The method was used to develop a novel approach for finding optimal controls for quantum systems in [3], and in many works of various scientists : [4], [5] et [6] especially. However, the properties of the discrete version of these procedures have not been yet tackled with. We present here a stable time and space discretization which preserves the monotonic properties of the monotonic algorithms.

Key words

quantum control, monotonically convergent algorithms, Krotov method,

Notations

Ω	Espace des configurations
$\mathcal{H}$	Espace de Hilbert correspondant a un systeme quantique. On prends generalement $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ ou $L^2(\Omega, C^n)$ (a verifier)
$\mathcal{H}^*$	Dual de $\mathcal{H}$
$\lVert\cdot\rVert$	norme associée à $\mathcal{H}$
$\langle\cdot,\cdot\rangle$	produit hermitien associé à $\mathcal{H}$ $\langle\psi,\phi\rangle = \sum_{k=1}^{n} \psi_k^* \phi_k$ en dimension finie $\langle\psi,\phi\rangle = \int_\Omega \psi^*(x)\phi(x)dx$ en dimension infinie on note indifféremment $\langle\psi,\phi\rangle = \langle\psi\|\|\phi\rangle = \langle\psi\|\phi\rangle$
$\|\phi\rangle$	notation ket de Dirac dans ce memoire on note indifféremment $\phi = \|\phi\rangle \in \mathcal{H}$
$\langle\psi\|$	notation bra de Dirac dans ce memoire on note indifféremment $\psi = \langle\psi\| \in \mathcal{H}^*$
$L^2(\Omega)$	L'espace des fonctions de carré intégrable sur Ω
$H^n(\Omega)$	L'espace des fonctions de $L^2(\Omega)$ dont les dérivées partielles jusqu'à l'ordre n appartiennent à $L^2(\Omega)$
$\|\cdot\|$	Valeur absolue
$H_u(z)$	Matrice hessienne de la fonction u au point z
$(\cdot,\cdot)$	Produit scalaire de $\mathbb{R}^d$
∇u	Gradient de la fonction u
A^T	Transposée de la matrice A
$\Re$	Partie réelle
$\Im$	Partie imaginaire

Table des matières

Introduction

Origines de la mécanique quantique

A la fin du XIXe siècle, les diverses branches de la physique s'intégraient dans un édifice cohérent, basé sur l'étude de deux types d'objets distincts, la matière et le rayonnement :

— La matière est faite de corpuscules parfaitement localisables dont le mouvement peut être décrit par la mécanique de Newton. Les grandeurs physiques associées à ces corpuscules s'expriment en fonction des composantes de la position et de l'impulsion qui sont les variables dynamiques fondamentales.

— Le rayonnement est gouverné par les lois de l'électromagnétisme de Maxwell. Ses variables dynamiques sont les composantes en chaque point de l'espace des champs électrique et magnétique.

Le succès de la physique était à cette époque impressionnant et tous les phénomènes connus trouvaient leur explication dans le cadre de ce programme classique.

A l'aube du XXe siècle et avec l'essor des progrès technologiques, les physiciens se trouvèrent tout a coup confrontés à des phénomènes nouveaux pour lesquels les prévisions de la théorie classique sont en désaccord flagrant avec l'expérience. Il fallait donc jeter les bases d'une nouvelle théorie susceptible de pallier les insuffisances de la conception classique. (une transition serait appreciable)

Contrôle optimal et optimisation numérique

L'objet de notre étude est un système quantique, modelisé entre deux mesures par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H(x)\psi(x,t) \tag{1}$$

En vue de modéliser les intéractions onde-matière a l'échelle atomique, nous introduisons un contrôle, généré par un dipole électrostatique de moment dipolaire $\mu(x)$, émetant un champs (électrique) laser, d'amplitude $\varepsilon(t)$ dépendant du temps.
La dynamique du systeme est désormais donnée par :

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) & = H(x)\psi(x,t) - \mu(x)\varepsilon(t)\psi(x,t) \\ \psi(x,t=0) & = \psi_0(x) \end{cases} \tag{2}$$

H étant un operateur hermitien, défini par :

$$H = H_0 + V = -\frac{1}{2m}\Delta + V$$

En posant :

$$A(\psi(t), \varepsilon(t)) = -i(H(x) - \mu(x)\varepsilon(t))\psi(x,t) \tag{3}$$

On se ramène au problème de Cauchy

$$\begin{cases} \dot{\psi}(t) & = A(\psi(t), \varepsilon(t)) \\ \psi(t=0) & = \psi_0 \end{cases} \tag{4}$$

Nous nous posons maintenant deux questions.

Problème de contrôlabilité

Un système est dit contrôlable si on peut le ramener à tout état prédéfini au moyen d'un contrôle. Plus précisément on pose la définition suivante (indiquer les ensembles)

Définition 1. *On dit que le système* (4) *est contrôlable (ou commandable) si pour tous les états* ψ_0 *,* ψ_{cible} *, il existe un temps fini T et un contrôle admissible* $\varepsilon(.)$ *tel que* $\psi_{cible} = \psi(T, \psi_0, \varepsilon(.))$.

Si la condition précédente est remplie, existe-t-il un contrôle joignant ψ_0 à ψ_{cible} , et qui de plus minimise une certaine fonctionnelle $J(\varepsilon)$?

Contrôle optimal

Existe t-il un contrôle pour atteindre un etat cible (upgrade). Nous voulons construire un controle d'amplitude "raisonnable" afin d'ammener le système d'un etat initial ψ_0 a un etat cible $O\psi(T)$. O etant l'observable decrivant l'état cible.

On considere ainsi une fonctionnelle J

$$J(\varepsilon) = \langle \psi(T)|O|\psi(T)\rangle - \alpha \int_0^T \varepsilon^2(t)dt \quad \alpha \in \mathbb{R}_+ \tag{5}$$

et on se pose le probleme : Trouver ε tel que ε resouds

$$\max_{\varepsilon \in L^2(0,T)} J(\varepsilon)$$

Au maximum de la fonctionnelle $J(\varepsilon)$, les équations de Euler-Lagrange sont satisfaites. Le Lagrangien du système est donné par :

$$\mathcal{L}(\psi, \varepsilon, \chi) = J(\varepsilon) - 2\Re\Big\{ \int_0^T \langle \chi(t)|\partial_t + i(H_0 + V - \mu(x)\varepsilon(t))|\psi(t)\rangle dt \Big\} \tag{6}$$

Schémas monotones

Une strategie efficace de résolution de ces équations est donnée par une classe d'algorithmes relevant du contrôle quantique, les schémas monotones. Ils ont etes introduits en 1992 par David Tannor, Vladimir Kazakov et V. Orlov, [3], sur la base des travaux de Krotov(precision). Une amelioration a ensuite ete proposee par Wusheng Zhu et Herschel Rabitz [4] en 1998. Une généralisation est donnée par Yvon Maday et Gabriel Turinici en 2003 [5].

Question : Comment construire une discrétisation temporelle puis spaciale de ces algorithmes qui préserve la propriété de monotonie ?

(Plan)

MÉCANIQUE QUANTIQUE ET CONTRÔLE OPTIMAL

1.1 La mécanique quantique en trois postulats

1.1.1 Premier postulat de la mécanique quantique

Fonction d'onde

En mécanique quantique, l'état d'un système donné, est donné par son vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$. L'espace des états dépend du système considéré. Par exemple, dans le cas le plus simple où le système n'a pas de spin, les états quantiques sont des fonctions ψ :

$$\begin{aligned} \psi : \quad & \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C} \\ & (x,y,z) \mapsto \psi(x,y,z) \end{aligned}$$

telles que l'intégrale $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ converge. Dans ce cas, ψ est appelée la fonction d'onde du système.

Cas d'une particule dans l'espace a une dimension

La probabilité pour que la particule soit dans l'intervalle $[a,b]$ est donnée par l'aire de la courbe située entre $x=a$ et $x=b$ (figure si possible)

$$\int_a^b dP(x) = \int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx \tag{1.1}$$

Il est impossible de connaître avec précision la position de la particule a un instant t. On ne peut que connaître la probabilité $dP(x)$ pour qu'elle soit entre x et $x+dx$, soit :

$$dP(x) = |\psi(x,t)|^2 dx = \psi(x,t)\overline{\psi(x,t)}dx \tag{1.2}$$

La particule doit être quelque part sur l'axe $X'OX$, par conséquent :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \tag{1.3}$$

pour tout t. ψ est donc de carre sommable. La densite de probabilite est donnee par

$$\frac{dP(x,t)}{dx} = |\psi(x,t)|^2 = \rho(x,t) \tag{1.4}$$

Cas d'une particule dans l'espace à trois dimensions

On a

$$\int dP(\vec{r},t) = \iiint_{espace} |\psi(x,t)|^2 d^3r = 1 \tag{1.5}$$

Ou d^3r représente l'élément de volume donnée par :

$$d^3r = dxdydz = r^2 sin\theta dr d\theta d\varphi$$

Cas de N particules

L'espace le mieux adapté à la description des systèmes en physique quantique est un espace Ω, nommé espace des configurations qui représente l'ensemble de toutes les configurations possibles du système. Par exemple, dans le cas d'un système à N particules isolées et sans contraintes, l'espace des configurations est $\Omega = \mathbb{R}^{3N}$ et $\psi(x,t) \in L^2(\Omega, \mathbb{C})$.

Postulat 1. *A tout système quantique correspond un espace de Hilbert complexe $\mathcal{H}$, tel que l'ensemble des états accessibles au système soit en bijection avec la sphère unité de $\mathcal{H}$.*

1.1.2 Observables et deuxième postulat

Une observable est l'équivalent en mécanique quantique d'une grandeur physique en mécanique classique, comme la position, la quantité de mouvement, l'énergie, etc. Une observable est formalisée mathématiquement par un opérateur hermitien (endomorphisme autoadjoint) sur $\mathcal{H}$ (chaque état quantique est représenté par un vecteur de $\mathcal{H}$).

Exemple 1.1. *Exemples d'observables*

1. *la position : X*
2. *l'énergie potentielle : V*
3. *la quantité de mouvement : $P = -i\hbar\nabla$*
4. *l'énergie cinétique : $H_0 = \dfrac{P \cdot P}{2m} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$*
5. *l'énergie totale, appelé hamiltonien : $H = H_0 + V$*

Postulat 2. *A toute grandeur physique représentée par l'observable $\mathcal{A}$ correspond un opérateur A auto-adjoint sur $\mathcal{H}$, vérifiant la propriété suivante : le résultat de la mesure d'une grandeur physique $\mathcal{A}$ ne peut être qu'un élément du spectre de A.*

Les valeurs propres sont les valeurs pouvant résulter d'une mesure idéale de cette propriété, les vecteurs propres étant l'état quantique du système immédiatement après la mesure et résultant de cette mesure. Ce postulat peut donc s'écrire :

$$A|\alpha_n\rangle = a_n|\alpha_n\rangle$$

où A, $|\alpha_n\rangle$ et a_n désignent, respectivement, l'observable, le vecteur propre et la valeur propre correspondante.
Les états propres de tout observable A forment une base orthonormée dans l'espace de

Hilbert $\mathcal{H}$. Cela signifie que tout vecteur $|\psi(t)\rangle$ peut se décomposer de manière unique sur la base de ces vecteurs propres $|\phi_i\rangle$:

$$|\psi\rangle = c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle + ... + c_n|\phi_n\rangle + ...$$

La moyenne des mesures de $\mathcal{A}$ est quant à elle égale à $\langle\psi|A|\psi\rangle$ où la notation $\langle\cdot|A|\cdot\rangle$ est définie par :

$$\langle\psi|A|\chi\rangle = \int_\Omega \bar{\psi}A\chi \tag{1.6}$$

Exemple 1.2. *La position moyenne sur l'axe des abcisses :*

$$\langle X\rangle = \int_{-\infty}^{-\infty} x|\psi(x,t)|^2 dx$$

1.1.3 Equation de Schrödinger et troisième postulat

L'équation de Schrödinger, proposée par le physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1952, est une équation fondamentale en mécanique quantique. Elle décrit l'évolution dans le temps d'une particule massive non relativiste, et remplit ainsi le même rôle que la relation fondamentale de la dynamique en mécanique classique $\dfrac{dp}{dt} = F$.

Postulat 3. *Entre deux mesures, l'évolution de l'état est régie par l'équation de Schrödinger*

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H(x)\psi(x,t) \tag{1.7}$$

Considerons le cas d'une particule libre ($V = 0$) et menons notre étude sur $\mathbb{R}^m$ ($m \geq 1$) nous étudions alors l'équation

$$u'(t) = Au(t) \tag{1.8}$$

où A est un operateur sur $E = L^2(R^m)$ defini par

$$Au = ik\Delta u = ik(\partial_1^2 u + ... + \partial_m^2 u)$$

k une constante reelle. Le domaine de A est l'ensemble des $u \in L^2(R^m)$ tel que Δu (au sens des distributions) appartient a L^2.

Définition 1.1. *On dit que le probleme de Cauchy pour l'equation* (1.8) *est bien pose si les deux hypotheses suivantes sont satisfaites :*

(a) ***Existance et unicite de solutions*** *: Il existe un sous espace dense D de E tel que, pour tout $u_0 \in D$, il existe une unique solution $u(.)$ de* (1.8) *avec $u(0) = u_0$*

(b) ***La solution dépend de façon continue des données*** *Il existe une fonction non décroissante, non négative $C(t)$ tel que*

$$||u(t)|| \leq C(t)||u(0)||$$

En appliquant la transformee de Fourier a (1.8), nous obtenons

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[Au](\xi) &= \mathcal{F}[ik\Delta u](\xi)\\ &= ik\mathcal{F}[\Delta u](\xi)\\ &= -ik|\xi|^2\mathcal{F}[u](\xi)\\ \mathcal{F}[Au](\xi) &= -ik|\xi|^2\tilde{u}(\xi)\end{aligned}$$

Alors si $u_0 \in D(A)$ nous obtenons une solution :

$$u(t) = \mathcal{F}^{-1}(exp(-ik|\xi|^2 t)\mathcal{F}[u_0](\xi)) \tag{1.9}$$

Puisque $D(A)$ est dense dans E, on deduis que (1.8) admet une unique solution sur E.
Ensuite, observons que si $u \in D(A)$, alors

$$\begin{aligned}(Au, u) &= (\mathcal{F}[Au], \mathcal{F}[u])\\ &= ik\int |\xi|^2|\tilde{u}|^2\end{aligned}$$

Ainsi, $\Re(Au, u) = 0$
Par consequent, si $u(.)$ est une solution de (1.8), nous avons :

$$\begin{aligned}\partial_t||u(t)||^2 &= 2\Re(u'(t), u(t))\\ &= 2(Au(t), u(t))\\ &= 0\end{aligned}$$

Ainsi, $||u(t)||$ est constante :

$$||u(t)|| = ||u(0)|| \quad \forall t \in \mathbb{R} \tag{1.10}$$

En conclusion, le probleme de Cauchy pour (1.8) est bien pose pour tout t.
En outre, [10] generalise ce resultat sur $E = L^p(\mathbb{R}^m)$ avec $1 \leq p < m$.

1.2 Controle quantique bilinéaire

On rappelle que l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H(x)\psi(x,t) \tag{1.11}$$

Nous travaillons en unités atomiques ($\hbar = 1$) a

En vue de modéliser les intéractions onde-matière a l'échelle atomique, nous introduisons un contrôle, généré par un dipole électrostatique de moment dipolaire $\mu(x)$, émetant un champs (électrique) laser, d'amplitude $\varepsilon(t)$ dépendant du temps.
La dynamique du systeme est désormais donnée par :

$$\begin{cases} i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) & = H(x)\psi(x,t) - \mu(x)\varepsilon(t)\psi(x,t)\\ \psi(x, t=0) & = \psi_0(x)\end{cases} \tag{1.12}$$

1.3 Discrétisation temporelle

1.3.1 Méthode du splitting d'opérateur

1.3.2 Schéma de Cranck-Nicholson

CHAPITRE DEUX

CHAP2

2.1 Sec 2.1

CHAPITRE TROIS

CHAP3

3.1 Sec 3.1

Bibliographie

[1] Krotov, V.F., Feldman, I.N. *Iterative methods for solving extreme problems*. In the book : Modeling of technical and economic processes, Moscow, Moscow Economic and Statistical Institute (MESI) Publ. (1978), 54–65. (en russe)

[2] Krotov, V.F., Feldman, I.N. *An iterative method for solving problems of optimal control*. Engineering Cybernetics, 21 :2 (1983), 123–130.

[3] Tannor, D., Kazakov, V., Orlov, V. *Control of photochemical branching : Novel procedures for finding optimal pulses and global upper bounds*. Time Dependent Quantum Molecular Dynamics, edited by Broeckhove J. and Lathouwers L. Plenum, 347–360 (1992)

[4] Zhu, W., Rabitz, H. *A rapid monotonically convergent iteration algorithm for quantum optimal control over the expectation value of a positive definite operator*. J. Chem. Phys. 109, 385–391 (1998)

[5] Maday, Y., Turinici, G. *New formulations of monotonically convergent quantum control algorithms*. J. Chem. Phys. 118, 8191–8196 (2003)

[6] Maday, Y., Salomon, J. and Turinici, G.. *Monotonic time-discretized schemes in quantum control*. Num. Math., 2005.

[7] Salomon, J. *Contrôle en chimie quantique : conception et analyse de schémas d'optimisation*. 2005.

[8] Strang, G. *Accurate partial difference methods I : Linear Cauchy problems.*. Arch. Rat. Mech. and An. 12, 392–402 (1963)

[9] Trélat, E. *Contrôle optimal : théorie et applications*. avril 2016.

[10] Fattorini, H.O., Kerber, A. *The Cauchy problem* Encyclopedia of mathematics and its applications 18. Section, Analysis. -Cambridge Press. 2009.

[11] Dossa, A. *Cours de Physique Quantique*. 2015-2016.

[12] Glorieux, Q. *Cours 4 – Les principes de la mécanique quantique 3P001 – Universite Pierre et Marie Curie*. 2015-2016.