

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 déterminer 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 développements limités. Cette approche entraîne cependant parfois des instabilités numériques. Nous présentons 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, méthode 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 $L^2(\Omega, \mathbb{C}^n)$ (a verifier)
$\ \cdot\ $	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
$ \phi\rangle$	notation ket de Dirac
$L^2(\Omega)$	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

Table des matières

Résumé & Abstract	i
Notations	ii
Introduction	1
1 Mécanique quantique et contrôle optimal	4
1.1 La mécanique quantique en trois postulats	4
1.1.1 Premier postulat de la mécanique quantique	4
Bibliographie	7

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 à 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 appréciable)

Contrôle optimal et optimisation numérique

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

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

En vue de modéliser les interactions onde-matière à l'échelle atomique, nous introduisons un contrôle, généré par un dipôle électrostatique de moment dipolaire $\mu(x)$, émettant un champ (électrique) laser, d'amplitude $\varepsilon(t)$ dépendant du temps.

La dynamique du système est désormais donnée par :

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

Nous travaillons en unités atomiques ($\hbar = 1$) avec (à détailler ou à mieux définir par la suite) :

- Hamiltonien interne $H = H_0 + V$
- Operateur energie cinétique $H_0 = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^p \frac{1}{m_n} \Delta$

En posant :

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

On se ramène au problème de Cauchy

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

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 $\varepsilon(\cdot)$ tel que $\psi_{cible} = \psi(T, \psi_0, \varepsilon(\cdot))$.

Si la condition précédente est remplie, existe-t-il un contrôle joignant x_0 à x_1 , et qui de plus minimise une certaine fonctionnelle $C(u)$?

Contrôle optimal

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

On considère ainsi une fonctionnelle J

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

et on se pose le problème : Trouver ε tel que ε résouds

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

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

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

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 été introduits en 1992 par David Tannor, Vladimir Kazakov et V. Orlov, [3], sur la base des travaux de Krotov (precision). Une amélioration a ensuite été proposée 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 spatiale de ces algorithmes qui préserve la propriété de monotonie ?

(say it better) Dans ce travail, nous construisons et implémentons une telle discrétisation. Dans le premier chapitre nous introduisons la mécanique quantique en trois postulats. Dans le chapitre trois, nous présentons les résultats de nos simulations.

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, on représente l'état d'un système par un vecteur dans un espace de Hilbert. En raison de l'importance de ces produits scalaires, on utilise la notation bra-ket introduite par Dirac¹ pour représenter les états quantiques de manière concise et simple. Le vecteur ψ est ainsi noté $|\psi\rangle$ et appelé **ket**, tandis que son vecteur dual est appelé **bra** et noté $\langle\psi|$.

L'espace des états dépend du système considéré. Par exemple, dans le cas le plus simple où le système n'a pas de spin ou de structure interne, les états quantiques sont des fonctions ψ :

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

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 à 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)

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

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

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

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

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

1. Paul Dirac, Les Principes de la mécanique quantique [« The Principles of Quantum Mechanics »] (1re éd. 1930)

pour tout t . ψ est donc de carré sommable. La densité de probabilité est donnée par

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

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

On a

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

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

$$d^3r = dx dy dz = r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$$

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} .*

Dans la suite $\|\cdot\|$ et $\langle \cdot, \cdot \rangle$ désignent la norme et le produit hermitien associés à \mathcal{H} .

Observables et deuxième postulat

(talk about) Superposition des états

(A beaucoup mieux traiter) (voir doc upmc)

En mécanique quantique, une grandeur ne prend une valeur déterminée que lors d'une mesure :

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

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

$$\langle \psi | A | \chi \rangle = \int_{\Omega} \bar{\psi} A \chi \quad (1.6)$$

où ψ et χ sont des fonctions de $L^2(\Omega, \mathbb{C})$ et A un opérateur arbitraire défini de $L^2(\Omega, \mathbb{C})$ dans lui-même. (tableau observables)

Equation de Schrödinger et troisième postulat

L'équation de Schrodinger, conçue par le physicien autrichien Erwin Schrodinger 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.

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

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

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