

MEMOIRE DE MASTER

FILIÈRE : MATHÉMATIQUES FONDAMENTALES

THÈME

SCHÉMAS MONOTONES DISCRETS 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 sur 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 souvent 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. $\mathcal{H} = L^2(\Omega, \mathbb{C})$ ou \mathbb{C}^N en dimension finie
\mathcal{H}^*	Dual de \mathcal{H}
$\ \cdot\ $	norme associée à \mathcal{H}
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	produit hermitien sur \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
(\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

Dédicaces	i
Remerciements	ii
Résumé & Abstract	iii
Notations	iv
Introduction	1
1 Mécanique quantique et contrôle quantique	4
1.1 La mécanique quantique en trois postulats	4
1.1.1 Premier postulat de la mécanique quantique	4
1.1.2 Observables et deuxième postulat	5
1.1.3 Equation de Schrödinger et troisième postulat	6
1.2 Contrôle quantique	7
1.2.1 Exemple de modèle bilinéaire (BLM)	7
1.2.2 Cas d'un champ laser	8
1.3 Discrétisation temporelle	8
1.3.1 Méthode du splitting d'opérateur	8
1.3.2 Schéma de Cranck-Nicholson	10
2 Schémas monotones pour l'équation de Schrödinger	11
2.1 Introduction	11
2.2 Fonctionnelles de coût	11
2.3 Schémas monotones	12
3 Schémas monotones discrets	14
3.1 Calcul de variation	15
3.2 Schémas implicites	16
3.3 Schémas explicites	22
3.3.1 Monotonie imposée par une condition différentielle	22
3.3.2 Méthode du premier pas	22
3.3.3 Méthode du second ordre	24
Conclusion et perspectives	26
Bibliographie	27

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.

Contrôle optimal et optimisation numérique

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

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

En vue de modéliser les interactions onde-matière à 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 système est désormais donnée par :

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

H étant un opérateur hermitien, défini par :

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

En posant :

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

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.

Définition 1. On dit que le système (4) est contrôlable (ou commandable) si pour tous les états $\psi_0 \in \mathcal{H}$, $\psi_{cible} \in \mathcal{H}$, il existe un temps fini T et un contrôle admissible $\varepsilon(\cdot) : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ tel que $\psi_{cible} = \psi(T, \psi_0, \varepsilon(\cdot))$.

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

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 stratégie 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 [1], [2]. 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].

Comment construire une discrétisation temporelle puis spatiale de ces algorithmes qui préserve la propriété de monotonie ?

Dans le Chapitre Un, nous introduisons la mécanique quantique en trois postulats et présentons le cadre général du contrôle quantique. Le Chapitre Deux est dédié aux schémas monotones pour l'équation de Schrödinger. Différentes discrétisations de ces schémas sont proposées dans le Chapitre Trois.

MÉCANIQUE QUANTIQUE ET CONTRÔLE QUANTIQUE

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 :

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

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 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)

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

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 :

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

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

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

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

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

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} .*

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 : $H_0 = \frac{P \cdot P}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
5. l'énergie totale, appelé hamiltonien : $H = H_0 + V$

Postulat 2. *A toute grandeur physique représentée par l'observable 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 .*

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 $|\phi_i\rangle$:

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

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 :

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

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

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

1.1.3 Equation de Schrödinger et troisième postulat

L'équation de Schrödinger, proposée par le physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1926, 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 $\frac{dp}{dt} = F$.

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

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

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

$$u'(t) = Au(t) \quad (1.8)$$

où A est un opérateur sur $E = L^2(\mathbb{R}^m)$ défini par

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

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

Définition 1.1. On dit que le problème de Cauchy pour l'équation (1.8) est bien posé si les deux hypothèses suivantes sont satisfaites :

- (a) **Existence et unicité de solutions** : Il existe un sous espace dense D de E tel que, pour tout $u_0 \in D$, il existe une unique solution $u(\cdot)$ 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 transformée 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 :

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

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 conséquent, si $u(\cdot)$ 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 :

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

En conclusion, le problème de Cauchy pour (1.8) est bien posé 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

On rappelle que l'état $\psi(t)$ d'un systeme quantique evolue conformement a l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t), \quad \psi(t = 0) = \psi_0 \quad (1.11)$$

ou H est un endomorphisme auto-adjoint sur \mathcal{H} appelé Hamiltonien interne du système. \hbar est la constante de Planck. Dans la suite, nous travaillons en unités atomiques, c'est-à-dire $\hbar = 1$ et l'état initial a une norme unitaire, $||\psi_0||^2 \equiv \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$.

1.2.1 Exemple de modele bilineaire (BLM)

Pour simplifier, nous considerons un systeme quantique de dimension finie. C'est une approximation appropriée dans de nombreuses situations pratiques. Pour un systeme quantique de dimension N , \mathcal{H} est un espace de Hilbert complexe de dimension N .

Les valeurs propres $(\phi_i)_{1 \leq i \leq N}$ de H forment une base orthogonale de \mathcal{H} .

Dans de nombreuses situations, le contrôle du système peut-être réalisé par un ensemble de fonctions de contrôle $\varepsilon_k(t) \in \mathbb{R}$ couplées au système via une famille d'opérateurs hermitiens indépendants du temps $\{H_k, k = 1, 2, \dots\}$. L'Hamiltonien total $H + \sum_k \varepsilon_k(t)H_k$ détermine alors la nouvelle dynamique du système.

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = (H + \sum_k \varepsilon_k(t) H_k) \psi(x, t) \quad (1.12)$$

Le but typique d'un problème de contrôle quantique défini sur le système (1.12) est de trouver en temps fini $T > 0$ un ensemble de contrôles admissibles $u_k(t) \in \mathbb{R}$ qui conduit le système d'un état initial ψ_0 à un état prescrit ψ_{cible} .

1.2.2 Cas d'un champ laser

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 :

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= H \psi(x, t) - \mu(x) \varepsilon(t) \psi(x, t) \\ \psi(x, t = 0) &= \psi_0(x) \end{cases} \quad (1.13)$$

1.3 Discrétisation temporelle

Choisissons deux paramètres de discrétisation temporelle N et ΔT tel que $N\Delta T = T$ et notons ψ_j l'approximation de $\psi(j\Delta T)$, $0 \leq j \leq N$.

1.3.1 Méthode du splitting d'opérateur

Considérons l'équation différentielle ordinaire scalaire

$$\dot{x} = (a + b)x, \quad x(0) = x_0 \quad (1.14)$$

où a et b sont des scalaires. On connaît la solution exacte de cette équation :

$$\begin{aligned} x(t) &= \exp((a + b)t)x_0 = \exp(at)\exp(bt)x_0 \quad (\text{methode 1}) \\ &= \exp(bt)\exp(at)x_0 \quad (\text{methode 2}) \end{aligned}$$

Nous pouvons ainsi séparer l'évolution selon (1.14) en deux temps :

$$(L1) \begin{cases} \dot{y} = by, & y(0) = x_0 \\ \dot{x} = ax, & x(0) = y(t) \end{cases}$$

$$(L2) \begin{cases} \dot{y} = ay, & y(0) = x_0 \\ \dot{x} = bx, & x(0) = y(t) \end{cases}$$

Pour le systeme (L1), on a clairement

$$\begin{aligned} x(t) &= \exp(at)x_0 \\ &= \exp(at)y(t) \\ &= \exp(at)\exp(bt)y(0) \\ &= \exp(at)\exp(bt)x_0 \end{aligned}$$

Pour (L2), le calcul se fait de la meme maniere et donne le meme resultat.

On appelle **splitting de Lie** ou methode a pas fractionnaire les deux methodes (L1) et (L2). Pour une equation scalaire, ces deux methodes sont identiques et reviennent au meme que de traiter l'equation en une seule fois. Pour exprimer le splitting dans notre exemple, nous avons ete obliges d'introduire une variable intermediaire y . Ceci s'avererait a l'usage peu pratique pour des contextes plus compliques. Nous introduisons donc les semi-groupes.

Définition 1.2. Soit X un espace de Banach. Une famille $(T(t))_{t \geq 0}$ d'operateurs lineaires bornes de X dans X est un semi-groupe fortement continu d'operateurs lineaires bornés si

- (i) $T(0) = id_X$;
- (ii) $T(t+s) = T(t)T(s)$, $\forall t, s \geq 0$;
- (iii) $\forall x \in X$, $\mathbb{R} \ni t \mapsto T(t)x \in X$ est continue en 0.

Remarque 1.1. Un semi-groupe d'operateurs lineaires bornes $(T(t))_{t \geq 0}$, est uniformement continue si

$$\lim_{t \rightarrow 0} \|T(t) - I\| = 0$$

Un semi-groupe fortement continu d'operateurs lineaires bornés sur X sera appele semi-groupe de classe C_0 ou simplement C_0 semi-groupe.

Si seulement (i) et (ii) sont satisfaits, on dit que la famille $(T(t))_{t \geq 0}$ est un semi-groupe.

Définition 1.3. L'operateur lineaire A defini par

$$D(A) = \left\{ x \in X : \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{T(t)x - x}{t} \text{ existe} \right\} \quad (1.15)$$

et

$$Ax = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{T(t)x - x}{t} \quad \text{pour } x \in D(A) \quad (1.16)$$

est le generateur infinitesimal du semi-groupe $(T(t))_{t \geq 0}$; $D(A)$ est le domaine de A

Splittings de Strang

L'application qui a x_0 associe $x(t)$ par le flot de l'EDO est le semi-groupe que nous noterons $S(t)$

$$x(t) = S(t)x_0 = \exp((a+b)t)x_0 \quad (1.17)$$

On note $A(t)$ et $B(t)$ les semi-groupes associes aux deux parties de l'equation, a savoir

$$A(t)x_0 = \exp(at)x_0, \quad B(t)x_0 = \exp(bt)x_0$$

Les deux splittings de Lie (L1) et (L2) consistent donc à écrire

$$(L1) \ x(t) = A(t)B(t)x_0, \quad (L2) \ x(t) = B(t)A(t)x_0$$

On définit sans effort deux nouveaux types de splitting : les **splittings de Strang** [8]

$$(S1) \ x(t) = A\left(\frac{t}{2}\right)B(t)A\left(\frac{t}{2}\right)x_0, \quad (S2) \ x(t) = B\left(\frac{t}{2}\right)A(t)B\left(\frac{t}{2}\right)x_0$$

Les méthodes de Lie et de Strang sont respectivement d'ordre 1 et 2.

Splitting de Strang pour l'équation de Schrödinger

Afin de présenter le schéma de splitting, on considère un problème d'évolution général. Soit A et B , deux opérateurs auto-adjoints, tels que : $D(A) \subset \mathcal{H}$, $D(B) \subset \mathcal{H}$ et $A + B$ est un opérateur auto-adjoint sur $D(A) \cap D(B)$. On note ici $D(A)$ et $D(B)$ les domaines respectifs des opérateurs A et B . Considérons le problème d'évolution

$$\begin{cases} i\partial_t \psi(x, t) &= A\psi(x, t) + B\psi(x, t), \quad x \in \Omega, t > 0 \\ \psi(x, t = 0) &= \psi_0(x) \in \mathcal{H} \end{cases} \quad (1.18)$$

et notons $\psi(x, t) = e^{-i(A+B)t}\psi_0(x)$ sa solution pour $t > 0$, et $x \in \Omega$. Le schéma de splitting consiste à approcher la solution ψ du problème d'évolution via une approximation de l'opérateur $e^{-i(A+B)t}$ à travers les opérateurs e^{-iA} et e^{-iB} . Ceci permet alors d'avoir à résoudre successivement deux équations plus simples.

Ici, $A = H_0$ et $B = V(x) - \mu(x)\varepsilon(t)$ est la partie potentielle. On obtient l'approximation

$$\psi(x, t + \Delta T) \approx e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} e^{-i(V(x) - \mu\varepsilon)\Delta T} e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \psi(x, t) \quad (1.19)$$

Propriétés 1.1. Cette méthode conserve la norme L^2 de la fonction d'onde ψ au cours du temps.

Preuve. Les opérateurs exponentiels étant anti-hermitiens, leurs exponentielles sont en effet unitaires.

Cette propriété importante (1.10) est donc conservée après discrétisation. D'autres méthodes de résolution approchée peuvent être envisagées : schémas d'Euler, Runge-Kutta... Le problème posé par ces schémas est qu'ils ne conservent pas la norme de la solution en général.

1.3.2 Schéma de Cranck-Nicholson

Une exception existe avec le schéma implicite de Cranck-Nicholson défini dans notre cas par :

$$i \frac{\psi_{j+1} - \psi_j}{\Delta T} = (H_0 - \mu\varepsilon_j) \frac{\psi_{j+1} + \psi_j}{2} \quad (1.20)$$

En tant que schéma implicite, son inconvénient majeur est d'être coûteux.

SCHÉMAS MONOTONES POUR L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

2.1 Introduction

Considérons un système quantique décrit par une fonction d'onde $\psi(x, t)$ soumis à un champ électrique $\varepsilon(t)$ et dont l'état initial $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$ est supposé connu. Comme stipulé au (1.13), l'évolution d'un tel système est régie par l'équation :

$$\begin{cases} i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = H\psi(x, t) - \mu(x)\varepsilon(t)\psi(x, t) \\ \psi(x, t = 0) = \psi_0(x) \end{cases} \quad (2.1)$$

Le moment dipolaire μ est supposé connu et indépendant du temps.

2.2 Fonctionnelles de coût

Soit $\alpha \in \mathbb{R}^+$, O un opérateur symétrique borné, T un réel positif, ε une fonction de $L^2([0, T], \mathbb{R})$, $\psi : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{C}$ une fonction d'onde dépendant du temps et $\psi_{cible} : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ une fonction d'onde fixée.

Nous considérons deux fonctionnelles de coût :

$$J_1(\varepsilon) = \langle \psi(T) | O | \psi(T) \rangle - \alpha \int_0^T \varepsilon^2(t) dt \quad (2.2)$$

$$J_2(\varepsilon) = 2\Re \langle \psi_{cible} | \psi(T) \rangle - \alpha \int_0^T \varepsilon^2(t) dt \quad (2.3)$$

ψ_{cible} représente une fonction d'onde cible. J_1 relève du formalisme attaché aux observables tandis que J_2 est plus simple à manipuler. Le maximum du terme $2\Re \langle \psi_{cible} | \psi(T) \rangle$ est bien atteint pour $\psi(T) = \psi_{cible}$ puisque $\|\psi_{cible}\| = 1$ et que $2\Re \langle \psi_{cible} | \psi(T) \rangle = -\|\psi_{cible} - \psi(T)\|^2 + 2$.

les méthodes numérique d'optimisation reposent sur la résolution des équations d'Euler-Lagrange de la fonctionnelle traitée. Les équations d'Euler-Lagrange sont alors pour J_1 :

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H - \varepsilon(t) \mu(x) \psi(x, t) \\ \psi(x, t = 0) = \psi_0(x) \end{cases} \quad (2.4)$$

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \chi(x, t) = H - \varepsilon(t) \mu(x) \chi(x, t) \\ \chi(x, t = T) = O\psi(x, T) \end{cases} \quad (2.5)$$

$$\alpha \varepsilon(t) = -\Im \langle \chi(t) | \mu | \psi(t) \rangle \quad (2.6)$$

et pour J_2 :

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H - \varepsilon(t) \mu(x) \psi(x, t) \\ \psi(x, t = 0) = \psi_0(x) \end{cases} \quad (2.7)$$

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \chi(x, t) = H - \varepsilon(t) \mu(x) \chi(x, t) \\ \chi(x, t = T) = \psi_{cible}(x) \end{cases} \quad (2.8)$$

$$\alpha \varepsilon(t) = -\Im \langle \chi(t) | \mu | \psi(t) \rangle \quad (2.9)$$

L'existence de maxima de J_1 et de J_2 et de fonctionnelles plus générales a été montrée dans [15] et [16].

2.3 Schémas monotones

Les schémas monotones ont été introduits dans le cadre du contrôle quantique par D. Tannor dans [3] et par W. Zhu et H. Rabitz dans [4] sous deux formes différentes. En 2003, Y. Maday et G. Turinici [5] présentent une classe plus large de schémas monotones qui englobe les deux types d'algorithmes initiaux.

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \psi^k(x, t) = (H(x) - \mu(x) \varepsilon^k(t)) \psi^k(x, t) \\ \psi(x, t = 0) = \psi_0(x) \end{cases} \quad (2.10)$$

$$\varepsilon^k(t) = (1 - \delta) \tilde{\varepsilon}^{k-1}(t) - \frac{\delta}{\alpha} \Im \langle \chi^{k-1} | \mu | \psi^k \rangle(t) \quad (2.11)$$

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \chi^k(x, t) = (H(x) - \mu(x) \tilde{\varepsilon}^k(t)) \chi^k(x, t) \\ \chi^k(x, t = T) = O\psi^k(x, T) \end{cases} \quad (2.12)$$

$$\tilde{\varepsilon}^k(t) = (1 - \eta) \varepsilon^k(t) - \frac{\eta}{\alpha} \Im \langle \chi^k | \mu | \psi^k \rangle(t) \quad (2.13)$$

où δ et η sont deux paramètres réels. Le schéma Tannor [3] correspond au cas où $(\delta, \eta) = (1, 0)$ tandis que celui de Zhu et Rabitz [4] correspond au cas où $(\delta, \eta) = (1, 1)$.

La propriété la plus importante de cet algorithme est donnée dans le théorème suivant [5]

Théorème 2.1 (Maday, Y., Turinici, G. (2003)). *Supposons que O soit un opérateur semi-défini positif auto-adjoint. Alors, pour tout $\eta, \delta \in [0, 2]$ l'algorithme donné par les équations (2.10) à (2.13) converge de façon monotone dans le sens où $J(\varepsilon^{k+1}) \geq J(\varepsilon^k)$.*

Preuve. Evaluons la difference entre deux valeur de la fonctionnelle J_1 entre deux iterations successives. Supposons que $\eta \neq 0, \delta \neq 0$. Alors,

$$\begin{aligned} J(\varepsilon^{k+1}) - J(\varepsilon^k) &= \langle \psi^{k+1}(T) | O | \psi^{k+1}(T) \rangle - \alpha \int_0^T \varepsilon^{k+1}(t)^2 dt - \langle \psi^k(T) | O | \psi^k(T) \rangle \\ &\quad + \alpha \int_0^T \varepsilon^k(t)^2 dt \\ &= \langle \psi^{k+1}(T) - \psi^k(T) | O | \psi^{k+1}(T) - \psi^k(T) \rangle \\ &\quad + 2\Re \langle \psi^{k+1}(T) - \psi^k(T) | O | \psi^k(T) \rangle \\ &\quad + \alpha \int_0^T \varepsilon^k(t)^2 dt - \alpha \int_0^T \varepsilon^{k+1}(t)^2 dt \end{aligned}$$

Puisque, nous avons aussi

$$\begin{aligned} 2\Re \langle \psi^{k+1}(T) - \psi^k(T) | O | \psi^k(T) \rangle &= 2\Re \langle \psi^{k+1}(T) - \psi^k(T), O\psi^k(T) \rangle \\ &= 2\Re \langle \psi^{k+1}(T) - \psi^k(T), \chi^k(T) \rangle \\ &= 2\Re \int_0^T \left\langle \frac{\partial(\psi^{k+1}(t) - \psi^k(t))}{\partial_t}, \chi^k(t) \right\rangle \\ &\quad + \langle \psi^{k+1}(t) - \psi^k(t), \frac{\partial \chi^k(t)}{\partial_t} \rangle dt \\ &= 2\Re \int_0^T \left\langle \frac{H_0 - \mu \varepsilon^{k+1}}{i} \psi^{k+1}(t) - \frac{H_0 - \mu \varepsilon^k}{i} \psi^k(t), \chi^k(t) \right\rangle \\ &\quad + \langle \psi^{k+1}(t) - \psi^k(t), \frac{H_0 - \mu \tilde{\varepsilon}^k}{i} \chi^k(t) \rangle dt \\ &= 2\Re \int_0^T \varepsilon^{k+1} \left\langle \frac{-\mu}{i} \psi^{k+1}(t), \chi^k(t) \right\rangle - \varepsilon^k \left\langle \frac{-\mu}{i} \psi^k(t), \chi^k(t) \right\rangle \\ &\quad + \tilde{\varepsilon}^k \langle \psi^{k+1}(t) - \psi^k(t), \frac{-\mu}{i} \chi^k(t) \rangle dt \\ &= 2 \int_0^T \varepsilon^{k+1} \cdot \frac{\alpha(\varepsilon^{k+1} - (1 - \delta)\tilde{\varepsilon}^k)}{\delta} \\ &\quad - \varepsilon^k \cdot \frac{\alpha(\tilde{\varepsilon}^k - (1 - \eta)\varepsilon^k)}{\eta} \\ &\quad - \tilde{\varepsilon}^k \cdot \frac{\alpha(\varepsilon^{k+1} - (1 - \delta)\tilde{\varepsilon}^k)}{\delta} \\ &\quad + \tilde{\varepsilon}^{k+1} \cdot \frac{\alpha(\tilde{\varepsilon}^k - (1 - \eta)\varepsilon^k)}{\eta} dt \end{aligned}$$

nous obtenons donc

$$\begin{aligned} J(\varepsilon^{k+1}) - J(\varepsilon^k) &= \langle \psi^{k+1}(T) - \psi^k(T) | O | \psi^{k+1}(T) - \psi^k(T) \rangle \\ &\quad + \alpha \int_0^T \left(\frac{2}{\delta} - 1 \right) (\varepsilon^{k+1} - \tilde{\varepsilon}^k)^2 + \left(\frac{2}{\eta} - 1 \right) (\tilde{\varepsilon}^k - \varepsilon^k)^2 dt \end{aligned}$$

qui est positif sous les hypotheses du theoreme. Notons que le cas $\delta = 0$ entraine $\varepsilon^{k+1} = \tilde{\varepsilon}^k$ et $\eta = 0$ entraine $\tilde{\varepsilon}^k = \varepsilon^k$ et la meme conclusion est obtenue.

SCHÉMAS MONOTONES DISCRETS

Appliquons les calculs précédents aux problèmes de contrôle quantique présentés à la section 1.6 du chapitre 1. Les fonctionnelles à considérer dans ce cadre sont :

$$J_1(\varepsilon) = \langle \psi(T) | O | \psi(T) \rangle - \int_0^T \alpha(t) \varepsilon^2(t) dt \quad (3.1)$$

$$J_2(\varepsilon) = 2\Re \langle \psi_{cible} | \psi(T) \rangle - \int_0^T \alpha(t) \varepsilon^2(t) dt \quad (3.2)$$

Rappelons que l'opérateur O est défini positif et que ψ_{cible} représente une fonction de $L_2(\Omega, \mathbb{C})$ de norme 1, où Ω est l'espace des configurations. Rappelons également que les équations d'Euler-Lagrange associées à ces fonctionnelles sont dans le cas de J_1 :

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = (H - \varepsilon(t) \mu(x)) \psi(x, t) \\ \psi(x, t = 0) = \psi_0(x) \end{cases} \quad (3.3)$$

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \chi(x, t) = (H - \varepsilon(t) \mu(x)) \chi(x, t) \\ \chi(x, t = T) = O \psi(x, T) \end{cases} \quad (3.4)$$

$$\alpha(t) \varepsilon(t) = -\Im \langle \chi(t) | \mu | \psi(t) \rangle \quad (3.5)$$

et dans le cas de J_2 par :

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = (H - \varepsilon(t) \mu(x)) \psi(x, t) \\ \psi(x, t = 0) = \psi_0(x) \end{cases} \quad (3.6)$$

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \chi(x, t) = (H - \varepsilon(t) \mu(x)) \chi(x, t) \\ \chi(x, t = T) = \psi_{cible}(x) \end{cases} \quad (3.7)$$

$$\alpha(t) \varepsilon(t) = -\Im \langle \chi(t) | \mu | \psi(t) \rangle \quad (3.8)$$

où :

- $\psi(x, t)$ est la fonction d'onde du système contrôlé,
- H est l'Hamiltonien interne associé au système,
- $\mu(x)$ est le moment dipolaire, caractéristique lui aussi du système traité. L'opérateur μ est donc une fonction de $L^2(\Omega, \mathbb{R})$ que nous identifions avec l'opérateur associé : $\psi \mapsto \mu\psi$,
- $\varepsilon(t)$ est le terme de contrôle, soit, dans les cas qui nous intéressent, un champ électrique.

Sans perdre beaucoup de généralité au regard des différentes applications traitées par le contrôle quantique, supposons que l'Hamiltonien s'écrit sous la forme usuelle :

$$H = H_0 + V(x)$$

où H_0 est l'opérateur $-\Delta$, opposé du Laplacien et $V(x)$ est le potentiel électrostatique interne. Nous présentons plus précisément différents modèles et les paramètres qui leurs sont associés au chapitre 3.

De même qu'à la section 2.3, notons $(\psi_j)_{j=0\dots N}$, $(\chi_j)_{j=0\dots N}$, $(\varepsilon_j)_{j=0\dots N-1}$, $(\tilde{\varepsilon}_j)_{j=0\dots N-1}$ et $(\alpha_j)_{j=0\dots N-1}$, les différentes grandeurs discrétisées à un pas de temps ΔT . Les discrétisations des deux fonctionnelles conduisent à l'introduction de :

$$J_{\Delta T,1}(\varepsilon) = \langle \psi(T) | O | \psi(T) \rangle - \Delta T \sum_{j=0}^{N-1} \alpha_j \varepsilon_j^2 \quad (3.9)$$

$$J_{\Delta T,2}(\varepsilon) = 2\Re \langle \psi_{cible} | \psi(T) \rangle - \Delta T \sum_{j=0}^{N-1} \alpha_j \varepsilon_j^2 \quad (3.10)$$

Les propagations sont effectuées suivant les formules de splitting d'opérateur présentées au chapitre 1 :

$$\chi_j(x) = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} e^{i(V(x) - \mu(x)\tilde{\varepsilon}_j)\Delta T} e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \chi_{j+1}(x) \quad (3.11)$$

avec la condition $\chi_N = O\psi_N$ dans le cas de $J_{\Delta T,1}$ et $\chi_N = \psi_{cible}$ dans le cas de $J_{\Delta T,2}$ et

$$\psi_{j+1}(x) = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} e^{-i(V(x) - \mu(x)\varepsilon_j)\Delta T} e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \psi_j(x) \quad (3.12)$$

avec un état initial ψ_0 fixé.

3.1 Calcul de variation

Les résultats de la section 2.3 peuvent être appliqués aux deux fonctionnelles $J_{\Delta T,1}$ et $J_{\Delta T,2}$. Quelques précautions sont nécessaires puisque les formules de splitting (2.17) et (2.18) ne sont pas tout à fait les mêmes que (2.9) et (2.10) puisque les opérateurs rencontrés dans le cadre de l'équation Schrödinger ne commutent pas. Cette restriction n'est cependant pas contraignante et il suffit d'effectuer formellement les remplacements suivants :

$$\begin{aligned} e^{A^*(\bar{u}_j^k)\Delta T} &\longleftarrow e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} e^{i(V(x) - \mu(x)\tilde{\varepsilon}_j^k)\Delta T} e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \\ e^{-A(u_j^{k+1})\Delta T} &\longleftarrow e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} e^{-i(V(x) - \mu(x)\varepsilon_j^{k+1})\Delta T} e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \end{aligned}$$

dans les formules (2.14). De plus, comme au chapitre 1, l'adjoint des fonction d'un facteur 12 de l'adjoint des sections précédentes. Les correspondances suivantes s'appliquent :

$$\begin{aligned} \Re(Y_{j+1}^k + \Delta T \nabla f(X_{j+1}^k)) &| e^{A(u_j^k)\Delta T} e^{-A(\bar{u}_j^k)\Delta T} - Id | X_{j+1}^k \rangle \\ &= 2\Re(\chi_{j+1}^k | e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} e^{-i\mu(\varepsilon_j^k - \tilde{\varepsilon}_j^k)\Delta T} e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} - Id | \psi_{j+1}^k \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \Re(Y_j^k | e^{A(\bar{u}_j^k)\Delta T} e^{-A(u_j^{k+1})\Delta T} - Id | X_j^{k+1} \rangle \\ &= 2\Re(\chi_j^k | e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} e^{-i\mu(\tilde{\epsilon}_j^k - \epsilon_j^{k+1})\Delta T} e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} - Id | \psi_j^{k+1} \rangle \end{aligned}$$

Posons alors :

$$\hat{\psi}_m^I = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \psi_m^I, \check{\psi}_m^I = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \psi_m^I, \hat{\chi}_m^I = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \chi_m^I, \check{\chi}_m^I = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \chi_m^I \quad (3.13)$$

pour finalement obtenir une version du lemme 2 adaptée au contrôle quantique :

Lemme 3.1. Soit $(\epsilon_j^k)_{j=0\dots N-1}^{k \in \mathbb{N}}$ et $(\tilde{\epsilon}_j^k)_{j=0\dots N-1}^{k \in \mathbb{N}}$ deux suites de champs discrets vérifiant :

$$\begin{aligned} & \forall j, \quad 0 \leq j \leq N, \\ & 2\Re(\check{\chi}_{j+1}^k | e^{-i\mu(\epsilon_j^k - \tilde{\epsilon}_j^k)\Delta T} - Id | \check{\psi}_{j+1}^k \rangle - \alpha_j \Delta T ((\tilde{\epsilon}_j^k)^2 - (\epsilon_j^k)^2) \geq 0, \quad (C_d) \\ & 2\Re(\hat{\chi}_j^k | e^{i\mu(\epsilon_j^{k+1} - \tilde{\epsilon}_j^k)\Delta T} - Id | \hat{\psi}_j^{k+1} \rangle - \alpha_j \Delta T ((\epsilon_j^{k+1})^2 - (\tilde{\epsilon}_j^k)^2) \geq 0 \end{aligned}$$

où $(\check{\chi}_j^k)_{j=0\dots N}^{k \in \mathbb{N}}$ et $(\hat{\chi}_j^k)_{j=0\dots N}^{k \in \mathbb{N}}$ désignent les adjoints associés à $(\tilde{\epsilon}_j^k)_{j=0\dots N-1}^{k \in \mathbb{N}}$ par (2.19) et (2.17) et $(\check{\psi}_j^k)_{j=0\dots N}^{k \in \mathbb{N}}$, $(\hat{\psi}_j^k)_{j=0\dots N}^{k \in \mathbb{N}}$ désignent les états associés à $(\epsilon_j^k)_{j=0\dots N-1}^{k \in \mathbb{N}}$ par (2.19) et (2.18). Alors ces suites entraînent une convergence monotone des fonctionnelles $J_{\Delta T,1}$ et $J_{\Delta T,2}$ définies par (2.15) et (2.16), c'est-à-dire :

$$\forall n \in \{1, 2\}, \forall k \in \mathbb{N}, J_{n,\Delta T}(\epsilon^{k+1}) - J_{n,\Delta T}(\epsilon^k) \geq 0$$

Nous pouvons alors concevoir des schémas monotones discrets en suivant les idées présentées au chapitre 1. Nous traduisons en termes discrets dans les sections suivantes les schémas à deux paramètres et les schémas de monotonie imposée par une condition différentielle.

3.2 Schémas implicites

Dans cette section nous nous inspirons de l'approche proposée à la section 1.6.3 du chapitre 1.

Pour se rapprocher du calcul continu, écrivons tout d'abord :

$$\Re(\check{\chi}_{j+1}^k | e^{-i\mu(\epsilon_j^k - \tilde{\epsilon}_j^k)\Delta T} - Id | \check{\psi}_{j+1}^k \rangle = (\epsilon_j^k - \tilde{\epsilon}_j^k) \Delta T \Im \langle \check{\chi}_{j+1}^k | \mu^*(\epsilon_j^k - \tilde{\epsilon}_j^k) | \check{\psi}_{j+1}^k \rangle$$

et

$$\Re(\hat{\chi}_j^k | e^{-i\mu(\epsilon_j^{k+1} - \tilde{\epsilon}_j^k)\Delta T} - Id | \hat{\psi}_j^{k+1} \rangle = (\epsilon_j^{k+1} - \tilde{\epsilon}_j^k) \Delta T \Im \langle \hat{\chi}_j^k | \mu^*(\epsilon_j^{k+1} - \tilde{\epsilon}_j^k) | \hat{\psi}_j^{k+1} \rangle$$

avec :

$$\mu^* : h \mapsto \frac{e^{-i\mu h \Delta T} - Id}{-ih \Delta T} \quad (3.14)$$

qui appartient donc à $\mathcal{C}(\mathbb{R}, L^2(\Omega, \mathbb{R}))$. Un résultat analogue à celui du chapitre 1 peut alors être énoncé.

Théorème 3.1. Soit $(\delta, \eta) \in [0, 2]^2$. Supposons que les suites $(\varepsilon_j^k)_{j=0 \dots N-1}^{k \in \mathbb{N}}$ et $(\tilde{\varepsilon}_j^k)_{j=0 \dots N-1}^{k \in \mathbb{N}}$ vérifient :

$$\begin{aligned} \forall j, \quad 0 \leq j \leq N, \forall k \in \mathbb{N} \\ \tilde{\varepsilon}_j^k &= (1 - \eta)\varepsilon_j^k - \frac{\eta}{\alpha_j} \Im \langle \check{\chi}_{j+1}^k | \mu^*(\varepsilon_j^k - \tilde{\varepsilon}_j^k) | \check{\psi}_{j+1}^k \rangle \\ \varepsilon_j^{k+1} &= (1 - \delta)\tilde{\varepsilon}_j^k - \frac{\delta}{\alpha_j} \Im \langle \hat{\chi}_j^k | \mu^*(\varepsilon_j^{k+1} - \tilde{\varepsilon}_j^k) | \hat{\psi}_j^{k+1} \rangle \end{aligned} \quad (3.15)$$

alors ces suites entraînent une convergence monotone des fonctionnelles $J_{\Delta T, 1}$ et $J_{\Delta T, 2}$, dans le sens où :

$$\forall n \in \{1, 2\}, \forall k \in \mathbb{N}, J_{n, \Delta T}(\varepsilon^{k+1}) - J_{n, \Delta T}(\varepsilon^k) \geq 0$$

Preuve. Grâce aux formules (2.21), nous obtenons les égalités suivantes :

$$2\Re(\check{\chi}_{j+1}^k | e^{-i\mu(\varepsilon_j^k - \tilde{\varepsilon}_j^k)\Delta T} - Id | \check{\psi}_{j+1}^k) - \alpha_j \Delta T ((\tilde{\varepsilon}_j^k)^2 - (\varepsilon_j^k)^2) = \Delta T \alpha_j \left(\frac{2}{\eta} - 1\right) (\tilde{\varepsilon}_j^k - \varepsilon_j^k)^2,$$

$$2\Re(\hat{\chi}_j^k | e^{i\mu(\varepsilon_j^{k+1} - \tilde{\varepsilon}_j^k)\Delta T} - Id | \hat{\psi}_j^{k+1}) - \alpha_j \Delta T ((\varepsilon_j^{k+1})^2 - (\tilde{\varepsilon}_j^k)^2) \Delta T \alpha_j \left(\frac{2}{\delta} - 1\right) (\varepsilon_j^{k+1} - \tilde{\varepsilon}_j^k)^2$$

Les inéquations (C_d) sont donc vérifiées et le théorème est alors démontré d'après le lemme 3. De même que dans le cas continu, un calcul analogue au précédent prouve que le résultat reste valable dans le cas où $\delta = 0$ ou $\eta = 0$.

Algorithme

Sur la base du théorème 2, nous pouvons alors proposer l'algorithme suivant, en conservant la notation μ^* définie en (2.20). Soit $(\delta, \eta) \in [0, 2]^2$.

- Etant donné $(\psi_j^k)_{j=0 \dots N}$ et $(\check{\psi}_j^k)_{j=0 \dots N}$ et donc $\chi_N^k = O\psi_N^k$ ou $\chi_N^k = \psi_{cible}$ selon que la fonctionnelle considérée soit $J_{\Delta T, 1}$ ou $J_{\Delta T, 2}$, calculer récursivement χ_j^k à partir de χ_{j+1}^k par les opérations suivantes :

1. Calcul de $\check{\chi}_{j+1}$ par :

$$\check{\chi}_{j+1} = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \chi_{j+1}^k$$

2. Calcul de $\tilde{\varepsilon}_j^k$ par résolution de :

$$\tilde{\varepsilon}_j^k = (1 - \eta)\varepsilon_j^k - \frac{\eta}{\alpha_j} \Im \langle \check{\chi}_{j+1}^k | \mu^*(\varepsilon_j^k - \tilde{\varepsilon}_j^k) | \check{\psi}_{j+1}^k \rangle \quad (3.16)$$

3. Calcul et sauvegarde de $\hat{\chi}_j^k$ par :

$$\hat{\chi}_j^k = e^{i(V - \mu \tilde{\varepsilon}_j^k)\Delta T} \check{\chi}_{j+1}$$

4. Calcul de ε_j^k par :

$$\chi_j^k = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \hat{\chi}_j^k$$

- Calculer récursivement ψ_{j+1}^{k+1} à partir de ψ_j^k par les deux calculs suivants :

1. Calcul de $\hat{\psi}_j^{k+1}$ par :

$$\hat{\psi}_j^{k+1} = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \psi_j^k$$

2. Calcul de ε_j^{k+1} par résolution de :

$$\varepsilon_j^{k+1} = (1 - \delta)\tilde{\varepsilon}_j^k - \frac{\delta}{\alpha_j} \Im \langle \chi_j^k | \mu^* (\varepsilon_j^{k+1} - \tilde{\varepsilon}_j^k) | \hat{\psi}_j^{k+1} \rangle$$

3. Calcul et sauvegarde de $\check{\psi}_{j+1}^{k+1}$ par :

$$\check{\psi}_{j+1}^{k+1} = e^{-i(V - \mu \varepsilon_j^{k+1})\Delta T} \hat{\psi}_j^{k+1}$$

4. Calcul de ψ_{j+1}^k par :

$$\psi_{j+1}^{k+1} = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \check{\psi}_{j+1}^{k+1}$$

Cet algorithme appelle plusieurs commentaires. Les différences avec les codes employés usuellement se situent dans les calculs de champs effectués aux étapes 2 et dans les sauvegardes des étapes 3.

Comme le montrent les équations (2.6) et (2.7), les codes habituels sauvegardent $(\chi_j^k)_{j=0 \dots N}$ et $(\psi_j^k)_{j=0 \dots N}$ pour calculer les champs et sont donc aussi coûteux du point de vue stockage en mémoire. Notons par contre que les équations (2.22) et (2.23) des étapes 2 sont implicites par rapport aux valeurs recherchées. Par conséquent, ces étapes sont potentiellement plus coûteuses en temps de calcul. Il nous faut de plus nous assurer de l'existence de solutions et chercher des méthodes pour les résoudre. Ces problèmes sont traités dans les sections suivantes. Les théorèmes qui suivent s'appliquent aux schémas monotones implicites liés à $J_{\Delta T, 2}$. Nous signalons les modifications à apporter dans le cas de $J_{\Delta T, 1}$.

Existence de solutions

Les équations (2.22) et (2.23) doivent permettre de définir respectivement $\tilde{\varepsilon}_j^k$ et ε_j^{k+1} . Pour dégager des conditions d'existence de solutions à ces équations, montrons tout d'abord que si elles existent, ces solutions sont nécessairement bornées. Notons $\|\mu\|_*$ la norme d'opérateur de μ et α_- le réel, supposé strictement positif, défini par :

$$\alpha_- = \inf_{j=0 \dots N-1} \{\alpha_j\}$$

Nous supposons à partir de maintenant que $\delta \neq 2$ et $\eta \neq 2$

Théorème 3.2. *Supposons que les équations (2.22) et (2.23) admettent pour solutions $\tilde{\varepsilon}_j^k$ et ε_j^{k+1} . Alors il existe un réel positif M , ne dépendant que de $\delta, \eta, \|\mu\|_*$ et $\|O\|_*$ tel que :*

$$\forall k \in \mathbb{N}, \forall j, 0 \leq j \leq N-1, |\tilde{\varepsilon}_j^k| \leq M, |\varepsilon_j^{k+1}| \leq M$$

Preuve. Définissons M par :

$$M = \max(\|(\tilde{\epsilon}_j^0)_{j=0\dots N-1}\|_\infty, \max(1, \frac{\delta}{2-\delta}, \frac{\eta}{2-\eta}) \frac{\|O\|_* \|\mu\|_*}{\alpha_-}) \quad (3.17)$$

et montrons par récurrence le résultat. Supposons la majoration suivante vraie au rang k :

$$|\tilde{\epsilon}_j^k| \leq M$$

La définition (2.23) entraîne :

$$|\epsilon_j^{k+1}| \leq |1 - \delta| M + \left| \frac{\delta}{\alpha_j} \Im < \hat{X}_j^k | \mu^*(\epsilon_j^{k+1} - \tilde{\epsilon}_j^k) | \tilde{\psi}_j^{k+1} > \right|$$

et l'inégalité des accroissements finis donne d'autre part :

$$\|\mu^*(\epsilon_j^{k+1} - \tilde{\epsilon}_j^k)\| = \left\| \frac{e^{-i\mu(\epsilon_j^{k+1} - \tilde{\epsilon}_j^k)\Delta T} - Id}{-i(\epsilon_j^{k+1} - \tilde{\epsilon}_j^k)\Delta T} \right\| \leq \|\mu\|_*$$

De cette dernière inégalité nous déduisons $\|\mu^*\|_\infty \leq \|\mu\|_*$. Puisque les normes des différentes fonctions sont conservées au cours de la propagation, nous avons de plus :

$$\|\hat{\psi}_j^{k+1}\| = 1$$

$$\|\hat{\chi}_j^k\| = \|\chi_N^k\| = \|O\chi_N^{k-1}\| \leq \|O\|_*$$

qui permet d'obtenir, d'après l'inégalité de Cauchy-Schwartz :

$$|\epsilon_j^{k+1}| \leq |1 - \delta| M + \delta \frac{\|O\|_* \|\mu\|_*}{\alpha_-}$$

Si $\delta \leq 1$, alors $|1 - \delta| = 1 - \delta$ et puisque $\frac{\|O\|_* \|\mu\|_*}{\alpha_-} \leq M$:

$$|\epsilon_j^{k+1}| \leq (1 - \delta)M + \delta M = M$$

Si $\delta \geq 1$, alors $|1 - \delta| = \delta - 1$ et puisque $\frac{\delta}{2-\delta} \frac{\|O\|_* \|\mu\|_*}{\alpha_-} \leq M$:

$$|\epsilon_j^{k+1}| \leq (\delta - 1)M + (2 - \delta)M = M$$

Partant de cette majoration sur les termes de la suite $(\epsilon_j^{k+1})_{j=0\dots N-1}$, un raisonnement analogue permet de déduire :

$$\forall j, 0 \leq j \leq N, |\tilde{\epsilon}_j^{k+1}| \leq M$$

ce qui achève la démonstration par récurrence.

Dans le cas des schémas monotones implicites liés à $J_{\Delta T, 1}$, un théorème analogue peut être démontré avec comme borne :

$$M = \max(\|(\tilde{\epsilon}_j^0)_{j=0\dots N-1}\|_\infty, \max(1, \frac{\delta}{2-\delta}, \frac{\eta}{2-\eta}) \frac{\|O\|_* \|\mu\|_*}{\alpha_-})$$

Partant de ce résultat, nous pouvons démontrer l'existence de (2.22) et (2.23).

Théorème 3.3. *Supposons que les opérateurs μ et O soient bornés, alors il existe une solution $(\varepsilon_j^{k+1}, \tilde{\varepsilon}_j^{k+1})$ à (2.22) et (2.23).*

Preuve. Soit M , le réel défini par (2.24). Etant donné $(\tilde{\varepsilon}_j^k)_{j=0\dots N-1}$ bornée par M , la preuve du théorème 3 montre que l'image de l'intervalle $[-M, M]$ par la fonction f , définie par :

$$f : x \mapsto (1 - \delta)\tilde{\varepsilon}_j^k + \frac{\delta}{\alpha_j} \Im \langle \hat{X}_j^k | \mu^*(x - \tilde{\varepsilon}_j^k) | \tilde{\psi}_j^{k+1} \rangle \quad (3.18)$$

est contenue dans $[-M, M]$. La fonction f étant continue, le théorème des valeurs intermédiaires permet alors de conclure à l'existence d'un point fixe pour cette fonction et donc d'une solution à (2.23). Un raisonnement analogue peut être mené pour prouver l'existence d'une solution à (2.22). Ceci achève la preuve par récurrence.

Le schéma exposé en 2.4.2 est donc bien défini et produit des champs bornés par le réel M . Un théorème identique peut bien entendu être montré dans le cas de $J_{\Delta T, 1}$.

Unicité et itérations de Picard

Continuons de noter M le réel défini dans (2.24). Pour résoudre (2.22) et (2.23) une méthode de Picard peut être employée. Le théorème suivant en donne les conditions de convergence.

Théorème 3.4. *Soit $(\tilde{\varepsilon}_j^k)_{j=0\dots N-1}$ une solution de (2.22). Si :*

$$\frac{\delta}{\alpha_-} \|O\|_* \|\mu\|_*^2 \Delta T < 1, \quad (3.19)$$

alors la solution de (2.23) est unique et est la limite de la suite $(u_n)_n$ définie par :

$$\begin{cases} u_0 \in [-M, M] \\ u_{n+1} = f(u_n), \end{cases} \quad (3.20)$$

où f est la fonction définie à l'équation (2.25).

Preuve. Pour alléger les notations dans les calculs qui suivent, μ désigne dans cette preuve aussi bien la fonction précédemment définie sur Ω que son évaluation $\mu(x)$ en un point quelconque de Ω .

Soit h la fonction continue définie par :

$$h(\theta) = \begin{cases} i & \text{si } \theta = 0 \\ \frac{e^{i\theta} - 1}{\theta} & \text{si } \theta \neq 0 \end{cases} \quad (3.21)$$

Avec cette définition μ^* défini en (2.20) vérifie :

$$\mu^*(x - \tilde{\varepsilon}_j^k) = -i\mu h(\mu(x - \tilde{\varepsilon}_j^k)\Delta T)$$

Notons de plus que pour tout réel θ , $h'(\theta) \leq 1$.

Puisque $\frac{d\mu^*(x - \tilde{\varepsilon}_j^k)}{dx} = -i\mu^2 \Delta T h'(\mu(x - \tilde{\varepsilon}_j^k)\Delta T)$, l'inégalité des accroissements finis donne :

$$|\mu^*(x - \tilde{\varepsilon}_j^k) - \mu^*(y - \tilde{\varepsilon}_j^k)| \leq \|\mu\|_*^2 \Delta T |x - y|,$$

ce qui conduit à :

$$|f(x) - f(y)| \leq \frac{\delta}{\alpha_-} \|O\|_* \|\mu\|_*^2 \Delta T |x - y|$$

et donne la conclusion annoncée.

Un résultat analogue peut bien entendu être obtenu pour l'existence de solution à (2.22) sous la condition :

$$\frac{\eta}{\alpha_-} \|O\|_* \|\mu\|_*^2 \Delta T < 1 \quad (3.22)$$

Dans le cas de $J_{\Delta T,1}$, les conditions (2.26) et (2.27) deviennent :

$$\frac{\delta}{\alpha_-} \|\mu\|_*^2 \Delta T < 1 \text{ et } \frac{\eta}{\alpha_-} \|\mu\|_*^2 \Delta T < 1$$

Nous déduisons de cette manière une condition suffisante d'unicité des solutions des équations (2.22) et (2.23) et une méthode de résolution.

Méthode de Newton

Considérons que les conditions (2.26) et (2.27) sont vérifiées. Plutôt que de considérer des itérations sur la fonction f définie par (2.25), la méthode de Newton prescrit de calculer des itérations sur la fonction g définie par :

$$g(x) = x - \frac{f(x) - x}{f'(x) - 1}$$

Si x_0 est solution de cette dernière et x un réel quelconque, il existe une valeur c_x comprise entre x et x_0 telle que :

$$g(x) - g(x_0) = g''(c_x) \frac{(x - x_0)^2}{2}$$

Une estimation grossière de $g''(c_x)$ peut être faite à partir de la continuité de g'' . Nous pouvons par exemple approcher $g''(c_x)$ par $g''(x_0)$. Un calcul permet d'obtenir :

$$|g''(x_0)| \leq \frac{\frac{\delta}{\alpha_-} \|O\|_* \|\mu\|_*^3 \Delta T^2}{1 - \frac{\delta}{\alpha_-} \|O\|_* \|\mu\|_*^2 \Delta T} \quad (3.23)$$

Notons que le dénominateur de cette fonction n'est pas nul lorsque la condition du théorème 5 est vérifiée. La majoration (2.28) peut être utilisée pour estimer la vitesse de convergence de la méthode de Newton.

L'estimation (2.28) devient dans le calcul de $\tilde{\varepsilon}$:

$$|g''(x_0)| \leq \frac{\frac{\eta}{\alpha_-} \|O\|_* \|\mu\|_*^3 \Delta T^2}{1 - \frac{\eta}{\alpha_-} \|O\|_* \|\mu\|_*^2 \Delta T} \quad (3.24)$$

Dans le cas de $J_{\Delta T,1}$, (2.28) et (2.29) deviennent :

$$|g''(x_0)| \leq \frac{\frac{\delta}{\alpha_-} \|\mu\|_*^3 \Delta T^2}{1 - \frac{\delta}{\alpha_-} \|\mu\|_*^2 \Delta T} \text{ et } |g''(x_0)| \leq \frac{\frac{\eta}{\alpha_-} \|\mu\|_*^3 \Delta T^2}{1 - \frac{\eta}{\alpha_-} \|\mu\|_*^2 \Delta T}$$

3.3 Schémas explicites

Des schémas explicites peuvent également être dégagés à partir des critères établis à la section 2.4.1. Rappelons que les champs doivent être calculés de telle sorte que les équations (C_d) du lemme 3 soient vérifiées.

3.3.1 Monotonie imposée par une condition différentielle

La méthode explicite décrite ci-dessous présente l'avantage par rapport au schéma implicite d'être plus simple à mettre en œuvre. Elle diminue en outre le coût de calcul. Reprenons la démarche exposée au chapitre 1 sur l'exemple du calcul de $\tilde{\varepsilon}_j^k$ à partir de ε_j^k . Le terme de gauche de l'inéquation (C_d) , qui nous guide dans notre détermination de $\tilde{\varepsilon}_j^k$, est nul pour le choix $\tilde{\varepsilon}_j^k$, est nul pour le choix $\tilde{\varepsilon}_j^{k+1} = \tilde{\varepsilon}_j^k$. Considérons alors les fonctions $l_{\varepsilon^k,j}$:

$$\tilde{l}_{\varepsilon^k,j} : x \mapsto 2\Re \langle \check{\chi}_{j+1}^k | e^{-i\mu(-x)\Delta T} - Id | \check{\psi}_{j+1}^k \rangle - \alpha_j \Delta T x (x + 2\varepsilon_j^k)$$

et $l_{\tilde{\varepsilon}^k,j}$:

$$l_{\tilde{\varepsilon}^k,j} : x \mapsto 2\Re \langle \hat{\chi}_j^k | e^{-i\mu x \Delta T} - Id | \hat{\psi}_j^{k+1} \rangle - \alpha_j \Delta T x (x + 2\tilde{\varepsilon}_j^k)$$

Puisque $\tilde{l}'_{\varepsilon^k,j}(0) = 0$ et $l'_{\tilde{\varepsilon}^k,j}(0) = 0$, l'idée sur laquelle nous nous appuyons dans cette section est de chercher localement des valeurs \tilde{h}_j^k et h_j^k telles que $\tilde{l}_{\varepsilon^k,j}(\tilde{h}_j^k) > 0$ et $l_{\tilde{\varepsilon}^k,j}(h_j^k) > 0$. Par la suite, nous aurons besoin des dérivées des fonctions $\tilde{l}_{\varepsilon^k,j}$ et $l_{\tilde{\varepsilon}^k,j}$. Donnons les expressions de leurs deux premières dérivées :

$$\begin{aligned} \tilde{l}'_{\varepsilon^k,j} : x &\mapsto 2\Im \langle \check{\chi}_{j+1}^k | \mu \Delta T e^{-i\mu(-x)\Delta T} | \check{\psi}_{j+1}^k \rangle - 2\alpha_j \Delta T (x + \varepsilon_j^k) \\ \tilde{l}''_{\varepsilon^k,j} : x &\mapsto -2\Re \langle \check{\chi}_{j+1}^k | \mu^2 \Delta T^2 e^{-i\mu(-x)\Delta T} | \check{\psi}_{j+1}^k \rangle - 2\alpha_j \Delta T \\ l'_{\tilde{\varepsilon}^k,j} : x &\mapsto 2\Im \langle \hat{\chi}_j^k | \mu \Delta T e^{-i\mu x \Delta T} | \hat{\psi}_j^{k+1} \rangle - 2\alpha_j \Delta T (x + \tilde{\varepsilon}_j^k) \\ l''_{\tilde{\varepsilon}^k,j} : x &\mapsto -2\Re \langle \hat{\chi}_j^k | \mu^2 \Delta T^2 e^{-i\mu x \Delta T} | \hat{\psi}_j^{k+1} \rangle - 2\alpha_j \Delta T \end{aligned}$$

3.3.2 Méthode du premier pas

Les fonctions $\tilde{l}_{\varepsilon^k,j}$ et $l_{\tilde{\varepsilon}^k,j}$ permettent de déterminer des valeurs convenables de \tilde{h}_j^k et h_j^{k+1} . Le schéma obtenu est le suivant :

Soit $(h_j^*)_{j=1 \dots N-1}$ une suite arbitraire de réels positifs.

- Etant donné $(\psi_j^k)_j$ et $(\check{\psi}_j^k)_j$ et donc $\chi_N^k = O\psi_N^k$ ou $\chi_N^k = \psi_{cible}$ selon que la fonctionnelle considérée soit $J_{\Delta T,1}$ ou $J_{\Delta T,2}$, calculer récursivement χ_j^k selon les étapes suivantes :

1. Calcul de $\check{\chi}_{j+1}^k$ par :

$$\check{\chi}_{j+1}^k = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \chi_{j+1}^k$$

2. Calcul de \tilde{s}_j^k par :

$$\tilde{s}_j^k = \text{sign}(\tilde{l}_j^k(0))$$

3. Calcul de $\tilde{\varepsilon}_j^k$ par :

(a) Assignment $\tilde{h}_j^k = \tilde{s}_j^k h_j^*$

(b) Assignment $\tilde{\varepsilon}_j^k = \varepsilon_j^k + \tilde{h}_j^k$

(c) Si $\tilde{l}_{\varepsilon^k,j}(\tilde{h}_j^k) < 0$, assignation $\tilde{h}_j^k = \frac{\tilde{h}_j^k}{2}$ et retour à la sous-étape 3b,

4. Calcul et sauvegarde de $\hat{\chi}_j^k$ par :

$$\hat{\chi}_j^k = e^{i(V - \mu \tilde{\varepsilon}_j^k) \Delta T} \check{\chi}_{j+1}^k$$

5. Calcul de χ_j^k par :

$$\chi_j^k = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \hat{\chi}_j^k$$

- Calculer récursivement ψ_{j+1}^{k+1} à partir de ψ_j^k selon les étapes suivantes :

1. Calcul de $\hat{\psi}_j^{k+1}$ par :

$$\hat{\psi}_j^{k+1} = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \psi_j^k$$

2. Calcul de s_j^{k+1} par :

$$s_j^{k+1} = \text{sign}(l_j^{k+1}(0))$$

3. Calcul de ε_j^{k+1} par :

(a) Assignment $h_j^{k+1} = s_j^{k+1} h_j^*$

(b) Assignment $\varepsilon_j^{k+1} = \tilde{\varepsilon}_j^k + h_j^{k+1}$

(c) Si $l_{\varepsilon^k,j}(h_j^{k+1}) < 0$, assignation $h_j^{k+1} = \frac{h_j^{k+1}}{2}$ et retour à la sous-étape 3b,

4. Calcul et sauvegarde de $\check{\psi}_{j+1}^{k+1}$ par :

$$\check{\psi}_{j+1}^{k+1} = e^{-i(V - \mu \varepsilon_j^{k+1}) \Delta T} \hat{\psi}_j^{k+1}$$

5. Calcul de ψ_{j+1}^k par :

$$\psi_{j+1}^{k+1} = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \check{\psi}_{j+1}^{k+1}$$

où sign est la fonction à valeurs dans $\{-1, 1\}$ qui renvoie le signe de sa variable. Ce schéma conduit nécessairement à un accroissement des valeurs de la fonctionnelle, puisque pour \tilde{h}_j^k et h_j^{k+1} suffisamment petits, $\tilde{l}_{\varepsilon^k, j}(\tilde{h}_j^k) \geq 0$ et $l_{\varepsilon^k, j}(h_j^{k+1}) \geq 0$.

3.3.3 Méthode du second ordre

Suivant une démarche analogue à la précédente, nous pouvons diminuer la complexité du calcul en choisissant pour valeurs de ε_j^k et de ε_j^{k+1} des maxima locaux de $\tilde{l}_{\varepsilon^k, j}$ et de $l_{\varepsilon^k, j}$ dans des voisinages de ε_j^k et de $\tilde{\varepsilon}_j^k$. Ces maxima sont calculés approximativement par une itération de la méthode de Newton appliquée à $\tilde{l}_{\varepsilon^k, j}$ et $l_{\varepsilon^k, j}$. L'algorithme qui découle de cette démarche est le suivant :

1. Calcul de $\check{\chi}_{j+1}^k$ par :

$$\check{\chi}_{j+1}^k = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \chi_{j+1}^k$$

2. Calcul de $\tilde{\varepsilon}_j^k$ par :

$$\tilde{\varepsilon}_j^k = \varepsilon_j^k - \frac{\tilde{l}'_{\varepsilon^k, j}(0)}{\tilde{l}''_{\varepsilon^k, j}(0)}$$

3. Calcul et sauvegarde de $\hat{\chi}_j^k$ par :

$$\hat{\chi}_j^k = e^{i(V - \mu \tilde{\varepsilon}_j^k) \Delta T} \check{\chi}_{j+1}^k$$

4. Calcul de χ_j^k par :

$$\chi_j^k = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \hat{\chi}_j^k$$

• Calculer récursivement ψ_{j+1}^{k+1} à partir de ψ_j^k selon les étapes suivantes :

1. Calcul de $\hat{\psi}_j^{k+1}$ par :

$$\hat{\psi}_j^{k+1} = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \psi_j^k$$

2. Calcul de ε_j^{k+1} par :

$$\varepsilon_j^{k+1} = \tilde{\varepsilon}_j^k - \frac{\tilde{l}'_{\varepsilon^k, j}(0)}{\tilde{l}''_{\varepsilon^k, j}(0)}$$

3. Calcul et sauvegarde de $\check{\psi}_{j+1}^{k+1}$ par :

$$\check{\psi}_{j+1}^{k+1} = e^{-i(V - \mu \varepsilon_j^{k+1}) \Delta T} \hat{\psi}_j^{k+1}$$

4. Calcul de ψ_{j+1}^k par :

$$\psi_{j+1}^{k+1} = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \psi_{j+1}^k$$

Cet algorithme ne conduit pas nécessairement à un algorithme monotone puisque les contraintes imposées par le lemme 3 ne sont pas forcément vérifiées. Elles le sont cependant lorsque les coefficients α_j sont suffisamment grands. En effet une interprétation des sous-étapes 2 est de considérer que $\tilde{\varepsilon}_j^k$ et ε_j^k sont comme les maxima des développements limités d'ordre 2 des fonctions $l_{\tilde{\varepsilon}^k,j}$ et $\tilde{l}_{\varepsilon^k,j}$. Lorsque les coefficients $(\alpha_j)_{j=0, \dots, N-1}$ sont grands ces polynômes sont alors des fonctions concaves et admettent bien un maximum positif. Dans les différentes applications traitées au chapitre 3, les contraintes du lemme 3 n'ont d'autre part jamais été violées par ce schéma.

Conclusion et perspectives

Le contrôle de l'équation de Schrödinger fait partie d'un domaine de recherche plus vaste appelé contrôle quantique. Le contrôle quantique a connu une activité intense ces deux dernières décennies ; ce n'est pas surprenant compte tenu de l'importance de la modélisation quantique dans science des matériaux, conception de médicaments, biologie moléculaire, etc.

Dans ce mémoire,
Nous avons donc
Somme toute,

Dans un travail futur, nous pensons nous intéresser à paralléliser sur plusieurs processeurs l'algorithme

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 – Université Pierre et Marie Curie*. 2015-2016.
- [13] Dong, D., Petersen, I.R. *Quantum control theory and applications : A survey*. 2011.
- [14] Bidégaray-Fesquet, B. *Méthodes numériques avancées pour la finance. — Méthodes de splitting*. 2009-2010.
- [15] E. Cancès, C. Le Bris, M. Pilot. *Optimal bilinear control for a Schrödinger equation*. C. R. Acad. Sci. Paris, 330 (Série 1) : 567–571, 2000.
- [16] L. Baudouin, J-P. Puel. *Bilinear optimal control problem on a Schrödinger equation with singular potentials*. 2005.