

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

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 optimal, contrôle quantique, schémas monotones, méthode de Krotov.

Abstract

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] and [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.

Keywords : optimal control, quantum control, monotonically convergent algorithms, Krotov method

Notations

Ω	Espace des configurations
\mathcal{H}	Espace de Hilbert correspondant à un système 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
$ \cdot $	Valeur absolue
(\cdot, \cdot)	Produit scalaire de \mathbb{R}^d
∇u	Gradient de la fonction u
\Re	Partie réelle
\Im	Partie imaginaire

Table des matières

Résumé	i
Abstract	ii
Notations	iii
Table des figures	vi
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 champs 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 Cadre général	11
2.1.1 Fonctionnelle de coût	11
2.1.2 Equations critiques, mutiplicateur de Lagrange	12
2.2 Application à l'équation de Schrödinger	13
2.2.1 Fonctionnelles de coût	14
2.3 Schémas monotones	15
3 Schémas monotones discrets	17
3.1 Introduction	17
3.2 Calcul de variation	18
3.3 Schémas implicites	20
3.3.1 Existence de solutions	23
3.3.2 Unicité et itérations de Picard	25
3.3.3 Méthode de Newton	26

3.4 Schémas explicites	26
Conclusion et perspectives	27
Annexe A	27
3.5 Rappels sur les espaces de Hilbert	28
3.5.1 Produit scalaire hermitien	28
3.5.2 Norme hermitienne	29
3.6 Opérateur hermitien	30
Bibliographie	31

Table des figures

1	Problème de contrôlabilité	2
2	Problème de contrôle optimal	3

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.

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 dipôle électrostatique de moment dipolaire $\mu(x)$, émettant 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

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

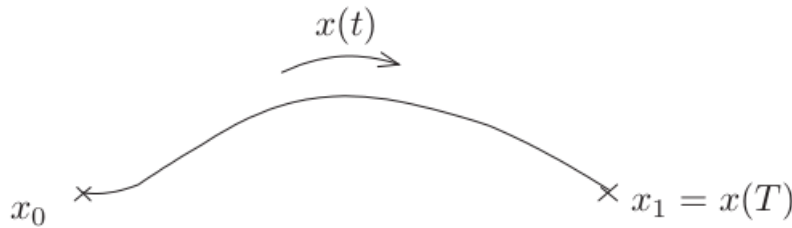
Nous nous posons maintenant deux questions.

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

FIGURE 1 – Problème de contrôlabilité



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

La fonctionnelle $J(\varepsilon)$ est un critère d'optimisation, on l'appelle le coût. Par exemple ce coût peut être égal au temps de parcours; dans ce cas c'est le problème du temps minimal.

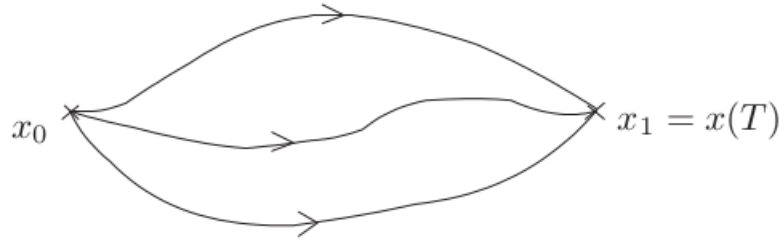
On considère ainsi une fonctionnelle J

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

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

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

FIGURE 2 – Problème de contrôle optimal



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

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

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 Premier, 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 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 :

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

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} .*

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 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, appelée 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

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

Considérons 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 à (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 déduit 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] généralise ce résultat sur $E = L^p(\mathbb{R}^m)$ avec $1 \leq p < m$.

1.2 Contrôle quantique

On rappelle que l'état $\psi(t)$ d'un système quantique évolue conformément à l'équation de Schrödinger :

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

où 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 modèle bilinéaire (BLM)

Pour simplifier, nous considérons un système quantique de dimension finie. C'est une approximation appropriée dans de nombreuses situations pratiques. Pour un système 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 champs 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 champs (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 tels 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 equation :

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

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 système (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 même manière et donne le même résultat.

On appelle **splitting de Lie** ou méthode à pas fractionnaire les deux méthodes (L1) et (L2). Pour une equation scalaire, ces deux méthodes sont identiques et reviennent au même que de traiter l'équation en une seule fois. Pour exprimer le splitting dans notre exemple, nous avons été obligés d'introduire une variable intermédiaire y . Ceci s'avérerait à l'usage peu pratique pour des contextes plus compliqués. Nous introduisons donc les semi-groupes.

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

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

Un semi-groupe fortement continu d'opérateurs linéaires bornés sur X sera appelé 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'opérateur linéaire A défini 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 générateur infinitésimal du semi-groupe $(T(t))_{t \geq 0}$; $D(A)$ est le domaine de A

Splittings de Strang

L'application qui à 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 associés aux deux parties de l'équation, à 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 antihermitiens, leurs exponentielles sont unitaires. En effet, notons X^T , \overline{X} et $X^\dagger = (\overline{X})^T$ respectivement la transposée, la conjuguée et l'adjointe de X . Puisque $e^{X^T} = (e^X)^T$ et $e^{\overline{X}} = \overline{e^X}$ alors $e^{X^\dagger} = (e^X)^\dagger$. Il s'ensuit que si X est antihermitienne, c'est-à-dire $X^\dagger = -X$, alors $(e^X)^{-1} = (e^X)^\dagger : e^X$ est unitaire.

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 Cadre général

Considérons un système décrit par une variable d'état X appartenant à un espace de Hilbert complexe \mathcal{H} et dont l'évolution est décrite par l'équation :

$$\begin{cases} \partial_t X + A(u)X &= 0 \\ X(0) &= X_0 \end{cases} \quad (2.1)$$

où X_0 est un état initial, u un paramètre du modèle appartenant à un ensemble \mathcal{U} , sur lequel un expérimentateur peut agir et où $A(u)$ est un opérateur défini sur \mathcal{H} . Supposons maintenant que l'on souhaite que le système adopte une configuration prescrite. Pour atteindre cet objectif, l'expérimentateur peut jouer sur le paramètre u auquel il soumet le système. Le processus qui consiste à transférer le système d'un état initial X_0 donné à un état final $X(T)$ convenable vis-à-vis de critères prédéfinis, portant sur $X(t)$ ou des caractéristiques du paramètre u , est appelé contrôle. Par extension, le terme contrôle désigne également la fonction u par laquelle est réalisée ce processus. L'espace \mathcal{U} est appelé ensemble des contrôles admissibles.

2.1.1 Fonctionnelle de coût

Pour transformer le problème de contrôle en un problème d'optimisation, il nous faut introduire une fonctionnelle. Cette fonctionnelle doit d'une part rendre compte, de l'écart entre l'état final et l'état cible et d'autre part pénaliser le champ de contrôle de sorte qu'il reste physiquement raisonnable. Un cas général fonctionnelle est :

$$J(u) = g(X(T)) + \int_0^T f(X(t))dt + \int_0^T h(u(t))dt \quad (2.2)$$

Dans cette fonctionnelle g, f, h sont des fonctions définies sur \mathcal{H} . Le problème peut alors se formuler de la manière suivante.

Chercher u^* tel que :

$$u^* = \operatorname{argmax} J(u)$$

sous les contraintes :

$$\begin{cases} \partial_t X + A(u)X &= 0 \\ X(0) &= X_0 \\ u &\in \mathcal{U} \end{cases}$$

Plusieurs méthodes d'optimisation numérique permettent de résoudre ce problème. Nous nous intéressons dans ce mémoire, à une classe d'algorithmes, appelés **schémas monotones** ou encore **algorithmes monotones**. Cette dénomination est due au fait qu'à chaque itération, le champ de contrôle produit par l'algorithme augmente la valeur de la fonctionnelle.

2.1.2 Equations critiques, multiplicateur de Lagrange

Au maximum de la fonctionnelle $J(u)$, les équations de Euler-Lagrange sont satisfaites. Le Lagrangien du système (2.1) est donné par :

$$L(u, X, Y) = J(u) - \Re \left\{ \int_0^T \langle Y(t) | \partial_t + A(u(t)) | X(t) \rangle dt \right\} \quad (2.3)$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} L(u, X, Y) &= g(X(T)) + \int_0^T f(X(t)) dt + \int_0^T h(u(t)) dt \\ &\quad - \Re \left\{ \int_0^T \langle Y(t) | \partial_t + A(u(t)) | X(t) \rangle dt \right\} \end{aligned}$$

ou encore,

$$\begin{aligned} L(u, X, Y) &= g(X(T)) + \int_0^T f(X(t)) dt + \int_0^T h(u(t)) dt \\ &\quad - \Re \left\{ \int_0^T \langle [\partial_t - A^*(u(t))] Y(t) | X(t) \rangle dt \right\} \end{aligned}$$

Afin d'obtenir les équations de Euler-Lagrange, il nous faut calculer la variation par rapport à Y , X , $X(T)$ et u .

$Y(t)$

$$\begin{aligned} L(u, X, Y + h) - L(u, X, Y) &= -\Re \int_0^T \langle Y(t) + h, (\partial_t + A(u(t))) X(t) \rangle dt \\ &\quad + \Re \int_0^T \langle Y(t), (\partial_t + A(u(t))) X(t) \rangle dt \\ &= \Re \int_0^T \langle h, (\partial_t + A(u(t))) X(t) \rangle dt \end{aligned}$$

Par suite,

$$\partial_Y L(u, X, Y) = 0 \iff \partial_t X + A(u)X = 0 \quad (2.4)$$

$\mathbf{X}(\mathbf{t})$

$$\begin{aligned}
L(u, X + h, Y) - L(u, X, Y) &= \int_0^T f(X + h)dt - \int_0^T f(X)dt \\
&\quad - \Re \int_0^T \langle (\partial_t - A^*(u(t)))Y, X + h \rangle dt \\
&\quad + \Re \int_0^T \langle (\partial_t - A^*(u(t)))Y, X \rangle dt \\
&= \int_0^T f(X + h) - f(X)dt \\
&\quad - \Re \int_0^T \langle (\partial_t - A^*(u(t)))Y, h \rangle dt
\end{aligned}$$

Par suite,

$$\partial_X L(u, X, Y) = 0 \iff \partial_t Y - A^*(u)Y = -\nabla f(X) \quad (2.5)$$

$\mathbf{u}(\mathbf{t})$

$$\begin{aligned}
L(u + h, X, Y) - L(u, X, Y) &= \int_0^T h(u + h)dt - \int_0^T h(u)dt \\
&\quad - \Re \int_0^T \langle Y, (\partial_t + A(u + h))X \rangle dt \\
&\quad + \Re \int_0^T \langle Y, (\partial_t + A(u))X \rangle dt \\
&= \int_0^T h(u + h) - h(u)dt \\
&\quad - \Re \int_0^T \langle Y, (-A(u + h) + A(u))X \rangle dt
\end{aligned}$$

Par suite,

$$\partial_u L(u, X, Y) = 0 \iff \Re \langle Y | \nabla A(u) | X \rangle = \nabla h(u) \quad (2.6)$$

Au total, nous obtenons :

$$\begin{cases} \partial_t X + A(u)X &= 0 \\ X(0) &= X_0 \end{cases} \quad (2.7)$$

$$\begin{cases} \partial_t Y - A^*(u)Y &= -\nabla f(X) \\ Y(T) &= \nabla g(X(T)) \end{cases} \quad (2.8)$$

$$\Re \langle Y | \nabla A(u) | x \rangle = \nabla h(u) \quad (2.9)$$

2.2 Application à l'équation de Schrödinger

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 :

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

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

2.2.1 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 :

$$J_1(\varepsilon) = \langle \psi(T) | O | \psi(T) \rangle - \alpha \int_0^T \varepsilon^2(t) dt \quad (2.11)$$

$$J_2(\varepsilon) = 2\Re \langle \psi_{cible} | \psi(T) \rangle - \alpha \int_0^T \varepsilon^2(t) dt \quad (2.12)$$

ψ_{cible} représente une fonction d'onde cible. J_1 relève du formalisme attaché aux observables tandis que J_2 est plus simple à utiliser au cours des simulations.

$$\begin{aligned} \|\psi_{cible} - \psi(T)\|^2 &= \int_0^T |\psi_{cible} - \psi(T)|^2 dt \\ &= \int_0^T \|\psi_{cible}\|^2 dt + \int_0^T \|\psi(T)\|^2 dt - 2\Re \int_0^T \langle \psi_{cible}, \psi(T) \rangle dt \\ &= 2 - 2\Re \langle \psi_{cible}, \psi(T) \rangle \end{aligned}$$

Ainsi $2\Re \langle \psi_{cible}, \psi_{cible} \rangle = 2$. Le maximum du terme $2\Re \langle \psi_{cible} | \psi(T) \rangle$ est bien atteint pour $\psi(T) = \psi_{cible}$.

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 :

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H - \varepsilon(t)\mu(x)\psi(x, t) \\ \psi(x, t=0) = \psi_0(x) \end{cases} \quad (2.13)$$

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \chi(x, t) = H - \varepsilon(t)\mu(x)\chi(x, t) \\ \chi(x, t=T) = O\psi(x, T) \end{cases} \quad (2.14)$$

$$\alpha \varepsilon(t) = -\Im \langle \chi(t) | \mu | \psi(t) \rangle \quad (2.15)$$

et pour J_2 :

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H - \varepsilon(t)\mu(x)\psi(x, t) \\ \psi(x, t=0) = \psi_0(x) \end{cases} \quad (2.16)$$

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \chi(x, t) = H - \varepsilon(t) \mu(x) \chi(x, t) \\ \chi(x, t = T) = \psi_{cible}(x) \end{cases} \quad (2.17)$$

$$\alpha \varepsilon(t) = -\Im \langle \chi(t) | \mu | \psi(t) \rangle \quad (2.18)$$

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.

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \psi^k(x, t) = (H(x) - \mu(x) \varepsilon^k(t)) \psi^k(x, t) \\ \psi(x, t = 0) = \psi_0(x) \end{cases} \quad (2.19)$$

$$\varepsilon^k(t) = (1 - \delta) \tilde{\varepsilon}^{k-1}(t) - \frac{\delta}{\alpha} \Im \langle \chi^{k-1} | \mu | \psi^k \rangle(t) \quad (2.20)$$

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \chi^k(x, t) = (H(x) - \mu(x) \tilde{\varepsilon}^k(t)) \chi^k(x, t) \\ \chi^k(x, t = T) = O \psi^k(x, T) \end{cases} \quad (2.21)$$

$$\tilde{\varepsilon}^k(t) = (1 - \eta) \varepsilon^k(t) - \frac{\eta}{\alpha} \Im \langle \chi^k | \mu | \psi^k \rangle(t) \quad (2.22)$$

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 (2.19) à (2.22) converge de façon monotone dans le sens où $J(\varepsilon^{k+1}) \geq J(\varepsilon^k)$.*

Preuve. *Evaluons la différence entre deux valeurs de la fonctionnelle J_1 entre deux itérations 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

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

nous obtenons donc

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

qui est positif sous les hypothèses du théorème. Notons que le cas $\delta = 0$ entraîne $\epsilon^{k+1} = \tilde{\epsilon}^k$ et $\eta = 0$ entraîne $\tilde{\epsilon}^k = \epsilon^k$ et la même conclusion est obtenue.

SCHÉMAS MONOTONES DISCRETS

3.1 Introduction

Nous considérons la fonctionnelles :

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

Pour les simulations numériques, nous considérons

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

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 :

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

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

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

et dans le cas de J_2 par :

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

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

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

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 perte de généralité 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.

Notons $(\psi_j)_{j=0\dots N}$, $(\chi_j)_{j=0\dots N}$, $(\varepsilon_j)_{j=0\dots N-1}$, et $(\tilde{\varepsilon}_j)_{j=0\dots N-1}$ les différentes grandeurs discrétisées à un pas de temps ΔT . Les discrétisations des deux fonctionnelles conduisent à :

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

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

Les propagations sont effectuées suivant les formules de splitting d'opérateur présentées au Chapitre Un :

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

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.

3.2 Calcul de variation

Nous reprenons le calcul de variation effectuée au Chapitre Deux avec nos fonctionnelles discrètes

$$\begin{aligned} J_{\Delta T}(\varepsilon') - J_{\Delta T}(\varepsilon) &= \langle \psi'_N - \psi_N | O | \psi'_N - \psi_N \rangle + 2\Re \langle \psi'_N - \psi_N | O | \psi_N \rangle \\ &\quad + \alpha \Delta T \left(\sum_{j=0}^{N-1} \varepsilon_j^2 - \varepsilon_j'^2 \right) \end{aligned}$$

Etudions le terme $\langle \psi'_N - \psi_N | O | \psi_N \rangle$ nous obtenons :

$$\begin{aligned}
\langle \psi'_N - \psi_N | O | \psi_N \rangle &= \langle \psi'_N - \psi_N, \chi_N \rangle \\
&= \sum_{j=0}^{N-1} \langle \psi'_{j+1} - \psi_{j+1}, \chi_{j+1} - \chi_j \rangle \\
&\quad + \sum_{j=0}^{N-1} \langle \psi'_{j+1} - \psi_{j+1} - \psi_{j+1} + \psi_j, \chi_j \rangle \\
&= \sum_{j=0}^{N-1} \langle \psi'_{j+1} - \psi_{j+1}, (e^{\frac{H_0 \Delta T}{2i}} e^{\frac{V - \mu \varepsilon_j}{i}} e^{\frac{H_0 \Delta T}{2i}} - 1) \chi_j \rangle \\
&\quad + \sum_{j=0}^{N-1} \langle (1 - e^{-\frac{H_0 \Delta T}{2i}} e^{\frac{-V + \mu \varepsilon_j}{i}} e^{-\frac{H_0 \Delta T}{2i}}) \psi'_{j+1}, \chi_j \rangle \\
&\quad + \sum_{j=0}^{N-1} \langle (1 - e^{-\frac{H_0 \Delta T}{2i}} e^{\frac{-V + \mu \varepsilon_j}{i}} e^{-\frac{H_0 \Delta T}{2i}}) \psi_{j+1}, \chi_j \rangle
\end{aligned}$$

Posons alors :

$$\tilde{\psi}_j = e^{-\frac{H_0 \Delta T}{2i}} \psi_j = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \psi_j \quad (3.13)$$

$$\check{\psi}_j = e^{\frac{H_0 \Delta T}{2i}} \psi_j = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \psi_j \quad (3.14)$$

$$\check{\chi}_j = e^{-\frac{H_0 \Delta T}{2i}} \chi_j = e^{iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \chi_j \quad (3.15)$$

et

$$\tilde{\chi}_j = e^{\frac{H_0 \Delta T}{2i}} \chi_j = e^{-iH_0 \frac{\Delta T}{2}} \chi_j \quad (3.16)$$

Par suite :

$$\begin{aligned}
\langle \psi'_N - \psi_N | O | \psi_N \rangle &= \sum_{j=0}^{N-1} \langle (e^{\frac{\mu(\tilde{\varepsilon}_j - \varepsilon'_j)}{i} \Delta T} - 1) \check{\psi}'_j, \tilde{\chi}_j \rangle \\
&\quad + \sum_{j=0}^{N-1} \langle \tilde{\psi}_{j+1} (e^{\frac{\mu(\tilde{\varepsilon}_j - \varepsilon_j)}{i} \Delta T} - 1) \check{\chi}_{j+1} \rangle
\end{aligned}$$

Le terme $(e^{\frac{\mu(\tilde{\varepsilon}_j - \varepsilon'_j)}{i} \Delta T} - 1)$ nous invite a definir :

$$\begin{aligned}
\mu^* : \quad \mathbb{R} \times \mathbb{R} &\rightarrow L^2(\Omega, \mathbb{R}) \\
(x, y) &\mapsto i \frac{e^{\frac{\mu(x-y)}{i} \Delta T} - Id}{\Delta T(x-y)}
\end{aligned} \quad (3.17)$$

On a aussi

$$\mu^*(x, y) = \frac{e^{-i\mu(x-y)\Delta T} - Id}{-i(x-y)\Delta T}$$

D'autre part, on pose :

$$\begin{cases} a_j(x, y) &= -\frac{1}{\alpha} \Im \langle \tilde{\chi}_j | \mu^*(x, y) | \tilde{\psi}'_j \rangle \\ b_j(x, y) &= -\frac{1}{\alpha} \Im \langle \tilde{\chi}_j | \mu^*(x, y) | \tilde{\psi}_j \rangle \end{cases} \quad (3.18)$$

Nous avons :

$$\begin{aligned} \Re \langle \psi'_N - \psi_N | O | \psi_N \rangle &= \alpha \Delta T \sum_{j=0}^{N-1} a_j(\tilde{\epsilon}_j, \epsilon'_j) (\epsilon'_j - \tilde{\epsilon}_j) \\ &\quad + b_{j+1}(\epsilon_j, \tilde{\epsilon}_j) (\tilde{\epsilon}_j - \epsilon_j) \end{aligned}$$

Nous obtenons ainsi

$$\begin{aligned} J_{\Delta T}(\epsilon') - J_{\Delta T}(\epsilon) &= \langle \psi'_N - \psi_N | O | \psi'_N - \psi_N \rangle \\ &\quad + \alpha \Delta T \sum_{j=0}^{N-1} [(\tilde{\epsilon}_j - a_j(\tilde{\epsilon}_j, \epsilon'_j))^2 - (\epsilon'_j - a_j(\tilde{\epsilon}_j, \epsilon'_j))^2 \\ &\quad + (\epsilon_j - b_{j+1}(\epsilon_j, \tilde{\epsilon}_j))^2 - (\tilde{\epsilon}_j - b_{j+1}(\epsilon_j, \tilde{\epsilon}_j))^2] \end{aligned}$$

Cette formule nous aidera à concevoir des schémas qui restent monotones après la discrétisation dans le temps. En effet, une partie négative des composantes de chaque somme apparaît explicitement. Annuler ou minimiser ces termes nous permettra de concevoir des schémas monotones.

Posons donc

$$\phi_j(\tilde{\epsilon}_j, \epsilon'_j) = (\tilde{\epsilon}_j - a_j(\tilde{\epsilon}_j, \epsilon'_j))^2 - (\epsilon'_j - a_j(\tilde{\epsilon}_j, \epsilon'_j))^2 \quad (3.19)$$

et

$$\tilde{\phi}_j(\epsilon_j, \tilde{\epsilon}_j) = (\epsilon_j - b_{j+1}(\epsilon_j, \tilde{\epsilon}_j))^2 - (\tilde{\epsilon}_j - b_{j+1}(\epsilon_j, \tilde{\epsilon}_j))^2 \quad (3.20)$$

Etant donne la suite (ϵ^k) :

1. l'analyse de la partie negative de $\tilde{\phi}_j(\epsilon_j^k, \tilde{\epsilon}_j^k)$ pour chaque j permet de definir la suite $(\tilde{\epsilon}^k)$
2. l'analyse de la partie negative de $\phi_j(\tilde{\epsilon}_j^k, \epsilon_j^{k+1})$ pour chaque j permet de definir la suite (ϵ^{k+1})

Nous en désuons des schémas implicites.

3.3 Schémas implicites

Une première idée simple consiste à annuler les parties négatives de ϕ et $\tilde{\phi}$. L'algorithme suivant est ainsi obtenu.

Algorithme

Etant donne les suites (ϵ^0) , $(\tilde{\epsilon}^0)$ leurs etat (ψ^0) et adjoint associes (χ^0) , supposons que l'on connait (ψ^k) , (χ^k) , (ϵ^k) et $(\tilde{\epsilon}^k)$. Définissons :

$$\begin{cases} a_j^k(x, y) &= -\frac{1}{\alpha} \Im \langle \tilde{\chi}_j^k | \mu^*(x, y) | \tilde{\psi}_j^{k+1} \rangle \\ b_j^k(x, y) &= -\frac{1}{\alpha} \Im \langle \tilde{\chi}_j^k | \mu^*(x, y) | \tilde{\psi}_j^k \rangle \end{cases} \quad (3.21)$$

$\chi_N^k = O\psi_N^k$ ou $\chi_N^k = \psi_{cible}^k$ selon que la fonctionnelle considérée soit $J_{\Delta T,1}$ ou $J_{\Delta T,2}$. Nous obtenons (ψ^{k+1}) , (χ^{k+1}) , (ϵ^{k+1}) et $(\tilde{\epsilon}^{k+1})$ de la facon suivante :

- Etant donné ψ_0^{k+1} , calculer récursivement ψ_{j+1}^{k+1} à partir de ψ_j^{k+1} par les deux calculs suivants :

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

$$\varepsilon_j^{k+1} = a_j^k(\tilde{\varepsilon}_j^k, \varepsilon_j^{k+1}) \quad (3.22)$$

2. Calcul de ψ_{j+1}^{k+1} par :

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

- Calculer récursivement χ_j^{k+1} à partir de χ_{j+1}^{k+1} par les opérations suivantes :

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

$$\tilde{\varepsilon}_j^{k+1} = b_{j+1}^{k+1}(\varepsilon_j^{k+1}, \tilde{\varepsilon}_j^{k+1}) \quad (3.23)$$

2. Calcul de χ_j^{k+1} par :

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

Cet algorithme est par construction une discrétisation monotone du schéma monotone décrit dans [4].

Une procédure plus générale, correspondant à la discrétisation implicite de la classe de schémas monotones introduite dans [5] peut être obtenue. Un résultat analogue à celui du Chapitre Deux peut 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 :

$$\forall j, 0 \leq j \leq N, \forall k \in \mathbb{N} \quad (3.24)$$

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

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

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 (3.24), nous obtenons les égalités suivantes :

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

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

Ce qui entraine

$$\begin{aligned} J_{\Delta T}(\varepsilon') - J_{\Delta T}(\varepsilon) &= \langle \psi'_N - \psi_N | O | \psi'_N - \psi_N \rangle \\ &+ \alpha \Delta T \sum_{j=0}^{N-1} \left[\left(\frac{2}{\delta} - 1 \right) (\varepsilon_j^{k+1} - \tilde{\varepsilon}_j^k)^2 \right. \\ &\left. + \left(\frac{2}{\eta} - 1 \right) (\tilde{\varepsilon}_j^k - \varepsilon_j^k)^2 \right] \end{aligned}$$

On conclut comme dans le cas continu. Aussi, 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 3.1, nous pouvons alors proposer l'algorithme suivant, en conservant la notation μ^* définie en (3.17). Soit $(\delta, \eta) \in [0, 2]^2$.

- Etant donné $(\psi_j^k)_{j=0 \dots N}$ et $(\tilde{\psi}_j^k)_{j=0 \dots N}$ 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 $\tilde{\chi}_{j+1}$ par :

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

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

$$\tilde{\varepsilon}_j^k = (1 - \eta) \varepsilon_j^k - \frac{\eta}{\alpha} \Im \langle \tilde{\chi}_{j+1}^k | \mu^* (\varepsilon_j^k, \tilde{\varepsilon}_j^k) | \tilde{\psi}_{j+1}^k \rangle \quad (3.25)$$

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

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

4. Calcul de χ_j^k par :

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

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

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

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

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

$$\varepsilon_j^{k+1} = (1 - \delta) \tilde{\varepsilon}_j^k - \frac{\delta}{\alpha} \Im \langle \tilde{\chi}_j^k | \mu^* (\varepsilon_j^{k+1}, \tilde{\varepsilon}_j^k) | \tilde{\psi}_j^{k+1} \rangle \quad (3.26)$$

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

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

4. Calcul de ψ_{j+1}^{k+1} par :

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

Il nous faut nous assurer de l'existence de solutions et chercher des méthodes pour les résoudre. Ces problèmes sont traités dans les sections suivantes.

3.3.1 Existence de solutions

Les équations (3.25) et (3.26) doivent permettre de définir respectivement $\tilde{\epsilon}_j^k$ 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 de l'opérateur μ .

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

Théorème 3.2. *Supposons que les équations (3.25) et (3.26) admettent comme solutions $\tilde{\epsilon}_j^k$ et ϵ_j^{k+1} . Alors il existe un réel positif M , ne dépendant que de $\delta, \eta, \|\mu\|_*$ et $\|O\|_*$ tel que :*

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

Preuve. Définissons M par :

$$M = \max(\|(\tilde{\epsilon}_j^0)_{j=0 \dots N-1}\|_\infty, \max(1, \frac{\delta}{2-\delta}, \frac{\eta}{2-\eta}) \frac{\|O\|_* \|\mu\|_*}{\alpha}) \quad (3.27)$$

et raisonnons par récurrence.

Dans un premier temps, on a bien

$$|\tilde{\epsilon}_j^0| \leq M \quad \forall 0 \leq j \leq N-1$$

Supposons maintenant que nous ayons à l'ordre k :

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

Par suite,

$$(3.26) \Rightarrow |\epsilon_j^{k+1}| \leq |1 - \delta|M + \frac{\delta}{\alpha} \Im < \tilde{X}_j^k | \mu^*(\epsilon_j^{k+1}, \tilde{\epsilon}_j^k) | \check{\psi}_j^{k+1} > |$$

D'après l'inégalité de Cauchy-Schwartz :

$$|\epsilon_j^{k+1}| \leq |1 - \delta|M + \frac{\delta}{\alpha} \|\tilde{X}_j^k\|_2 \|\mu^*(\epsilon_j^{k+1}, \tilde{\epsilon}_j^k) \check{\psi}_j^{k+1}\|_2$$

De plus, puisque les normes des différentes fonctions sont conservées au cours de la propagation, nous avons :

$$\|\check{\psi}_j^{k+1}\|_2 = 1$$

et

$$\begin{aligned} \|\tilde{\chi}_j^k\|_2 &= \|\chi_N^k\|_2 \\ &= \|O\psi_N^{k-1}\|_2 \\ &\leq \|O\|_* \|\psi_N^{k-1}\|_2 \\ &\leq \|O\|_* \end{aligned}$$

Par conséquent,

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

D'autre part, posons

$$f(x) = e^{\mu x}$$

f est continue et dérivable sur \mathbb{R} .

On a :

$$\mu^*(\varepsilon_j^{k+1}, \tilde{\varepsilon}_j^k) = \frac{f(-i(\varepsilon_j^{k+1} - \tilde{\varepsilon}_j^k)\Delta T) - f(0)}{-i(\varepsilon_j^{k+1} - \tilde{\varepsilon}_j^k)\Delta T - 0}$$

et

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad f'(x) \leq \|\mu\|_*$$

Alors, l'inégalité des accroissements finis donne :

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

De cette dernière inégalité nous déduisons $\|\mu^*\|_\infty \leq \|\mu\|_*$.

Qui permet d'obtenir :

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

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

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

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

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

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

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

ce qui achève la démonstration par récurrence.

Partant de ce résultat, nous pouvons démontrer l'existence de (3.25) et (3.26).

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 (3.25) et (3.26).

Preuve. Soit M , le réel défini par (3.27). Raisonnons par récurrence en supposant $(\tilde{\varepsilon}_j^k)_{j=0 \dots N-1}$ bornée par M .

Définissons la fonction f par :

$$f : x \mapsto (1 - \delta)\tilde{\varepsilon}_j^k - \frac{\delta}{\alpha} \Im \langle \tilde{\chi}_j^k | \mu^*(x, \tilde{\varepsilon}_j^k) | \tilde{\psi}_j^{k+1} \rangle \quad (3.28)$$

La preuve du théorème 3.2 nous montre que $\forall x \in [-M, M]$, $f(x) \in [-M, M]$.

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 (3.26). Un raisonnement analogue peut être mené pour prouver l'existence d'une solution à (3.25). Ceci achève la preuve par récurrence.

Le schéma exposé est donc bien défini et produit des champs bornés par le réel M .

3.3.2 Unicité et itérations de Picard

Continuons de noter M le réel défini dans (3.27). Pour résoudre (3.25) et (3.26) 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 (3.25). Si :

$$\frac{\delta}{\alpha} \|O\|_* \|\mu\|_*^2 \Delta T < 1, \quad (3.29)$$

alors la solution de (3.26) est unique et est la limite de la suite $(u_n)_n$ définie par :

$$\begin{cases} u_0 \in [-M, M] \\ u_{n+1} = f(u_n), \end{cases} \quad (3.30)$$

où f est la fonction définie à l'équation (3.28).

Preuve. Ici, μ désigne 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 :

$$h(x) = \begin{cases} i & \text{si } x = 0 \\ \frac{e^{ix}-1}{x} & \text{si } x \neq 0 \end{cases} \quad (3.31)$$

Pour tout réel x , $h'(x) \leq 1$
 μ^* défini en (3.17) vérifie :

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

Posons

$$\begin{aligned} \mu^{**}(x - y) &= \mu^*(x, y) \\ &= \frac{e^{-i\mu(x-y)\Delta T} - Id}{-i(x-y)\Delta T} \\ &= -\mu h(\mu(x-y)\Delta T) \end{aligned}$$

Par suite,

$$\frac{d\mu^{**}(x - \tilde{\varepsilon}_j^k)}{dx} = -i\mu^2 h'(\mu(x - \tilde{\varepsilon}_j^k)\Delta T)\Delta T$$

D'après l'inégalité des accroissements finis :

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

par conséquent :

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

et donne la conclusion annoncée.

Un résultat analogue peut bien entendu être obtenu pour l'existence de solution à (3.25) sous la condition :

$$\frac{\eta}{\alpha} \|O\|_* \|\mu\|_*^2 \Delta T < 1 \quad (3.32)$$

Nous déduisons de cette manière une condition suffisante d'unicité des solutions des équations (3.25) et (3.26) et une méthode de résolution.

3.3.3 Méthode de Newton

Considérons que les conditions et sont vérifiées. Plutôt que de considérer des itérations sur la fonction f définie par (3.28), 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 :

$$|g''(x_0)| \leq \frac{\frac{\delta}{\alpha} \|O\|_* \|\mu\|_*^3 \Delta T^2}{1 - \frac{\delta}{\alpha} \|O\|_* \|\mu\|_*^2 \Delta T} \quad (3.33)$$

Notons que le dénominateur de cette fonction n'est pas nul lorsque la condition du théorème 3.4 est vérifiée. La majoration (3.33) peut être utilisée pour estimer la vitesse de convergence de la méthode de Newton.

L'estimation (3.33) devient dans le calcul de $\tilde{\varepsilon}$:

$$|g''(x_0)| \leq \frac{\frac{\eta}{\alpha} \|O\|_* \|\mu\|_*^3 \Delta T^2}{1 - \frac{\eta}{\alpha} \|O\|_* \|\mu\|_*^2 \Delta T} \quad (3.34)$$

3.4 Schémas explicites

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

Annexe A : Espaces de Hilbert complexes et opérateurs hermitiens

3.5 Rappels sur les espaces de Hilbert

3.5.1 Produit scalaire hermitien

Les conventions qui suivent imposent un choix de l'argument qui est linéaire. Le choix ci-dessous (forme sesquilinéaire à gauche : première variable semi-linéaire, deuxième variable linéaire) est utilisé par les physiciens, ceci étant dû à l'origine à l'utilisation de la notation bra-ket introduite par Dirac¹, mais le choix opposé est courant en mathématiques.

Soit E un espace vectoriel sur \mathbb{C} .

Définition 3.1. Une forme sesquilinéaire à gauche est une application $b : E \times E \mapsto \mathbb{C}$ telle que

- pour tout $x \in E$, $b_1 : y \mapsto b(x, y)$ est linéaire ;
- pour tout $y \in E$, $b_2 : x \mapsto b(x, y)$ est semi-linéaire :
 - * pour tous $x_1, x_2 \in E$, on a $b_2(x_1 + x_2) = b_2(x_1) + b_2(x_2)$
 - * pour tous $x \in E$ et $\lambda \in \mathbb{C}$, on a $b_2(\lambda x) = \bar{\lambda} b_2(x)$

Définition 3.2. Une forme sesquilinéaire est dite hermitienne (ou à symétrie hermitienne) si pour tous $x, y \in E$, on a $b(y, x) = \overline{b(x, y)}$

Remarque 3.1. Remarquons que pour une forme hermitienne, on a $b(x, x) = \overline{b(x, x)}$ donc $b(x, x) \in \mathbb{R}$

Remarque 3.2. Une application $f : E \times E \rightarrow \mathbb{C}$ est une forme sesquilinéaire à droite, si et seulement si, l'application $b : E \times E \rightarrow \mathbb{C}$, définie par $b(x, y) = f(y, x)$ est sesquilinéaire à gauche.

Proposition 3.1. L'ensemble des formes sesquilinéaires hermitiennes sur E est un espace vectoriel complexe.

On note $q(x) = b(x, x)$ et on dit que q est la forme quadratique associée à b . On a $q(\lambda x) = |\lambda|^2 q(x)$ pour $\lambda \in \mathbb{C}$.

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

Identités de polarisation

Soit b une forme hermitienne. Soit $x, y \in E$.

$$b(x + y, x + y) = b(x, x) + b(y, y) + 2\Re(b(x, y)) \quad (3.35)$$

$$b(x + iy, x + iy) = b(x, x) + b(y, y) - 2\Im(b(x, y)) \quad (3.36)$$

$$b(x, y) = \frac{1}{4}[b(x + y, x + y) - b(x - y, x - y) + ib(x + iy, x + iy) - ib(x - iy, x - iy)] \quad (3.37)$$

$$\Re(b(x, y)) = \frac{1}{4}[b(x + y, x + y) - b(x - y, x - y)] \quad (3.38)$$

$$\Im(b(x, y)) = -\frac{1}{4}[b(x + iy, x + iy) - b(x - iy, x - iy)] \quad (3.39)$$

Définition 3.3. Un produit scalaire hermitien est une forme sesquilinéaire hermitienne définie positive, c'est-à-dire toute application b de $E \times E$ dans \mathbb{C} telle que :

1. b est une forme sesquilinéaire hermitienne
2. $\forall x \in E, b(x, x) \geq 0$
3. $\forall x \in E, b(x, x) = 0 \Rightarrow x = 0$

Définition 3.4. Un \mathbb{C} -espace vectoriel muni d'un produit scalaire est appelé espace préhilbertien complexe.

Si, de plus, il est de dimension finie, on dira que c'est un espace hermitien. On note le produit scalaire $b(x, y) = \langle x, y \rangle$

Exemple 3.1. L'espace \mathbb{C}^n avec

$$b(u, v) = \sum_{i=1}^n \overline{u_i} v_i$$

Exemple 3.2. L'espace $L^2(I)$ avec $I \subset \mathbb{R}$

$$b(g, h) = \int_I \overline{g(t)} h(t) dt$$

3.5.2 Norme hermitienne

Définition 3.5. Soit E un espace préhilbertien complexe. On pose $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$. On définit ainsi une norme sur E dite norme hermitienne

Relations entre norme et produit scalaire : identités de polarisation

Soit E un espace préhilbertien complexe. $x, y \in E$.

$$\|x + y\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2 + 2\Re(\langle x, y \rangle) \quad (3.40)$$

$$\|x + iy\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2 - 2\Im(\langle x, y \rangle) \quad (3.41)$$

$$\langle x, y \rangle = \frac{1}{4}[\|x + y\|^2 - \|x - y\|^2 - i\|x + iy\|^2 + i\|x - iy\|^2] \quad (3.42)$$

$$\|x + y\|^2 + \|x - y\|^2 = 2(\|x\|^2 + \|y\|^2) \quad (3.43)$$

Définition 3.6. Un espace préhilbertien complet pour la norme associée au produit scalaire est appelé espace de Hilbert.

3.6 Opérateur hermitien

Dans toute cette section, H_1 et H_2 désignent deux espaces de Hilbert. On dira que $T : H_1 \rightarrow H_2$ est un opérateur borné de H_1 dans H_2 si T est une application linéaire continue de H_1 dans H_2 . La définition ci-dessous généralise aux espaces de Hilbert la notion d'endomorphisme adjoint vue en L2 dans le cadre des espaces euclidiens.

Théorème 3.5. *Soit T un opérateur borné de H_1 dans H_2 . Il existe un et un seul opérateur borné T^* de H_2 dans H_1 vérifiant*

$$\forall (f, g) \in H_1 \times H_2, \langle Tf, g \rangle_{H_2} = \langle f, T^*g \rangle_{H_1}$$

L'opérateur T^* est appelé opérateur adjoint de T , et l'on a $\|T\|_{\mathcal{L}(H_1, H_2)} = \|T^*\|_{\mathcal{L}(H_2, H_1)}$

Définition 3.7. *On dit que $T \in \mathcal{L}(H)$ est un opérateur auto-adjoint ou hermitien si $T = T^*$, c'est-à-dire : pour tous $x, y \in H$,*

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle$$

Antihermitien si $A = -A^$.*

Unitaire si $AA^ = Id$.*

Si T est auto-adjoint alors pour tout $x \in H$, $\langle Tx, x \rangle$ est réel (même si H est un espace de Hilbert complexe).

Comme en dimension finie avec les endomorphismes symétriques, on peut définir les notions de positivité et de négativité pour les opérateurs auto-adjoints.

Définition 3.8. *On dit qu'un opérateur auto-adjoint T est positif si*

$$\forall x \in H, \langle Tx, x \rangle \geq 0$$

On dit qu'il est défini positif si l'inégalité ci-dessus est stricte pour $x \neq 0$.

On dit que T est négatif (resp. défini négatif) si $-T$ est positif (resp. défini positif).

Proposition 3.2. *Si T est opérateur auto-adjoint alors toutes ses valeurs propres sont réelles. Si de plus il est positif (resp. défini positif) alors toutes ses valeurs propres sont positives (resp. strictement positives).*

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.