ÉCOLE POLYTECHNIQUE Promotion 2003

CONTRÔLE CLASSANT ANALYSE NUMÉRIQUE ET OPTIMISATION
Lundi 27 juin 2005, durée 4 heures.
Sujet proposé par Claude Le Bris et Yvon Maday
Simulation et contrôle d'un système physique quantique

Avertissement 1 : Le texte qui suit utilise des fonctions à valeurs complexes, et la notion de produit hermitien. Les calculs peuvent donc devenir par endroit techniques, et un signe $-$ est vite oublié. En cas de telle difficulté, il ne faut donc pas hésiter à faire confiance au texte de l'énoncé.
Avertissement 2 : La partie 4, traitant de contrôle optimal, est indépendante des trois précédentes. Elle ne fait appel à aucune connaissance particulière en théorie du contrôle optimal, seulement à des notions de base en optimisation.

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^d$, $d = 1, 2, 3$ à frontière régulière et $\Omega_\#$ le pavé $]-\pi, \pi[^d$ (que l'on notera également Ω quand on sera clairement dans le contexte périodique). On introduit l'espace $L^2(\Omega; \mathbb{C})$ des fonctions mesurables sur Ω à valeurs dans $\mathbb{C}$ de module au carré intégrable, ainsi que l'espace $L^\infty(\Omega; \mathbb{C})$ des fonctions mesurables sur Ω à valeurs dans $\mathbb{C}$ et bornées presque partout. Ensuite on définit les espaces :

$$\begin{aligned} H^1(\Omega; \mathbb{C}) &= \{\psi \in L^2(\Omega; \mathbb{C}), \nabla\psi \in [\mathrm{L}^2(\Omega; \mathbb{C})]^{\mathrm{d}}\} \\ H^1_0(\Omega; \mathbb{C}) &= \{\psi \in H^1(\Omega; \mathbb{C}), \psi_{|\partial\Omega} = 0\} \\ H^1_\#(\Omega_\#; \mathbb{C}) &= \{\psi \in H^1(\Omega_\#; \mathbb{C}), 2\pi\text{périodique en chaque variable}\}. \end{aligned}$$

On rappelle bien sûr qu'une fonction f de la variable réelle est dite 2π-périodique si $f(\cdot + 2\pi) = f(\cdot)$. Soit V une fonction de $L^\infty(\Omega; \mathbb{R})$, c'est-à-dire une fonction bornée presque partout **à valeurs réelles**. On introduit l'opérateur :

$$H = -\Delta + V, \quad (\text{ on notera aussi } H_0 = -\Delta),$$

et on s'intéresse au problème : trouver ψ définie sur $\Omega \times]0, T[$ (ou $\Omega_\# \times]0, T[$ dans le cas périodique), telle que

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \tag{1}$$

et telle que, pour tout temps $t \in]0, T[$ $\psi(., t) \in H^1_0(\Omega; \mathbb{C})$ ($\psi(., t) \in H^1_\#(\Omega_\#; \mathbb{C})$ dans le cas périodique). Dans la suite on supposera qu'il existe une solution unique à ce problème vérifiant

$$\psi(x, t = 0) = \psi_0(x),$$

où ψ_0 est donnée. On supposera également qu'elle est aussi régulière que nécessaire, à la fois en espace et en temps.

1 : Etude théorique

On note pour commencer que pour tout $\psi \in L^2(\Omega; \mathbb{C})$, il existe deux fonctions ψ_r, ψ_i de $L^2(\Omega; \mathbb{R})$, telles que

$$\psi = \psi_r + i\psi_i.$$

Question 1.1 *En multipliant l'équation (1) par $\overline{\psi} = \psi_r - i\psi_i$ (le complexe conjugué de ψ), montrer, que si $\psi \in H^1_0$ est la solution de (1), la norme $\|\psi(., t)\|_{L^2(\Omega)} = \sqrt{\int_\Omega \psi(x, t)\overline{\psi}(x, t)dx}$ est constante en temps.*

Question 1.2

On note X l'espace $H^1_0(\Omega; C)$. Montrer que le problème (1) admet la formulation variationnelle équivalente suivante : trouver ψ, telle que pour tout temps $t \in]0, T[$, $\psi(., t) \in X$

$$\forall \varphi \in X, \quad i \int_\Omega \frac{\partial \psi}{\partial t} \overline{\varphi} = a(\psi, \varphi) = \int_\Omega \nabla\psi \overline{\nabla\varphi} + \int_\Omega V \psi \overline{\varphi}. \tag{2}$$

On supposera toute la régularité nécessaire en temps sur la solution ψ.

On admet que la même formulation est valable avec $X = H^1_\#(\Omega_\#; C)$ dans le cas périodique, car les conditions au bord périodiques conduisent à l'annulation de tous les termes de bord.

2 : Discrétisation en espace

On rappelle maintenant que l'opérateur H est symétrique dans $L^2(\Omega; \mathbb{R})$ et qu'il existe une suite croissante de valeurs propres réelles $(\lambda_n)_n$ avec des vecteurs propres associés $(\chi_n)_n$ dans $X \cap L^2(\Omega; \mathbb{R})$, que l'on choisit orthonormalisés dans $L^2(\Omega; \mathbb{R})$, tels que

$$H\chi_n = \lambda_n \chi_n. \tag{3}$$

On définit, pour tout entier N, l'espace $X_{S,N}$ (S pour “base spéciale”) par

$$X_{S,N} = \text{Vect}\,\{\chi_n, 0 \leq n \leq N\}. \tag{4}$$

Question 2.1 *Donner l'approximation interne générale du problème (2). Montrer qu'elle conduit à un système de $N+1$ équations à $N+1$ inconnues particulièrement simple qu'on résoudra.*

Question 2.2 *On se place ici dans le cas périodique, en dimension 1 (juste pour simplifier l'écriture) , et on considère les fonctions $\phi_k(x) = e^{ikx}$ pour $k \in \mathbb{Z}$ et le sous espace de $H^1_\#(\Omega_\#; C)$ noté X_N engendré par les ϕ_k avec $-N \leq k \leq N$.*

2.2.1 *Donner l'approximation interne générale du problème (2) dont la solution est notée ψ_N. On montrera qu'il existe une solution unique telle que $\psi_N(., t = 0)$ est donné mais que le problème ne peut plus* a priori *être résolu à la main.*

Pour mettre en oeuvre ce type de discrétisation, il convient de remarquer que le calcul de la contribution $\int_{\Omega_\#} V\psi_N\overline{\varphi}_N$ peut ne pas être très simple, on a alors recours à une formule d'intégration numérique où cette intégrale est approchée de la façon suivante

$$\int_{\Omega_\#} V\psi_N\overline{\varphi}_N \simeq \sum_{\ell=-N}^{N} V(\xi_\ell)\psi_N(\xi_\ell)\overline{\varphi}_N(\xi_\ell)\frac{2\pi}{2N+1}$$

où $\xi_\ell = \frac{(2\ell)\pi}{2N+1}$. Ces points permettent en fait de définir sur $\mathcal{C}^0(\Omega_\#)$ un “produit hermitien discret” par

$$(\varphi, \chi)_N = \sum_{\ell=-N}^{N} \varphi(\xi_\ell)\overline{\chi}(\xi_\ell)\frac{2\pi}{2N+1}. \tag{5}$$

2.2.2 *Montrer que*

$$\forall n,m,\ -N \leq n \leq N,\ -N \leq m \leq N, \quad \int_\Omega \phi_n(x)\overline{\phi}_m(x)dx = (\phi_n, \phi_m)_N, \tag{6}$$

et en déduire que $\forall \varphi_N \in X_N$, $\forall \Lambda_N \in X_N$,

$$\int_\Omega \varphi_N(x)\overline{\Lambda}_N(x)dx = (\varphi_N, \Lambda_N)_N. \tag{7}$$

2.2.3 *Montrer que le nouveau problème : trouver* $\Psi_N \in X_N$ *telle que*

$$\forall \varphi_N \in X_N, \quad i(\frac{\partial \Psi_N}{\partial t}, \varphi_N)_N = (\nabla \Psi_N, \nabla \varphi_N)_N + (V\Psi_N, \varphi_N)_N \tag{8}$$

possède une solution unique telle que $\Psi_N(.,t=0)$ *est donnée.*

2.2.4 *Montrer que la norme* L^2 *de* $\Psi_N(.,t)$ *reste constante en temps.*

Question 2.3 On suppose pendant un court instant que, au lieu de (1), on est en fait intéressé par résoudre le problème

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = H_0\psi. \tag{9}$$

2.3.1 *Montrer que la base associée en adaptant la question 2.1 à ce cadre est (au facteur de normalisation près) la base de Fourier* $\phi_k(x) = e^{ikx}$. *En déduire la forme exacte de la solution discrétisée en espace au temps* t. *On justifiera l'écriture*

$$\psi_N(.,t) = \exp(-iH_0t)\psi_{0,N}.$$

Symétriquement, on suppose que, au lieu de (1), on est intéressé maintenant à résoudre le problème

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = V\psi. \tag{10}$$

La formulation variationelle de ce problème avec intégration numérique est maintenant : trouver $\Psi_N \in X_N$ telle que

$$\forall \varphi_N \in X_N, \quad i\frac{d}{dt}(\Psi_N, \varphi_N)_N = (V\Psi_N, \varphi_N)_N. \tag{11}$$

2.3.2 *Montrer que la base des fonctions caractéristiques* $(h_i)_{i=0,..,2N}$ *de* X_N, *définie par* $h_i(\xi_j) = \delta_{i,j}$ *forme une base de vecteurs propres associés à l'opérateur* V *(encore au facteur de normalisation près). En déduire la forme exacte de la solution discrétisée en espace au temps* t. *On justifiera de même l'écriture*

$$\Psi_N(.,t) = \exp(-iVt)\Psi_{0,N}$$

Question 2.4 On reprend maintenant la question 2.2 sans intégration numérique.

2.4.1 *Montrer que pour tout* $\varphi_N \in X_N$ *on a*

$$i\int_\Omega \frac{\partial(\psi - \psi_N)}{\partial t}\overline{\varphi}_N dx = a(\psi - \psi_N, \varphi_N). \tag{12}$$

2.4.2 *Montrer que les opérateurs de projection sur X_N pour le produit hermitien de $L^2(\Omega_\#)$ et de $H^1_\#(\Omega_\#; C)$ coïncident. On notera Π_N cet opérateur unique.*

2.4.3 *On choisit maintenant $\varphi_N = \Pi_N\psi - \psi_N$ dans (12). Montrer que*

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_\Omega |\Pi_N\psi(x,t) - \psi_N(x,t)|^2 \leq \|V\|_{L^\infty(\Omega)}\|\psi(.,t) - \Pi_N\psi(.,t)\|_{L^2(\Omega)}\| \Pi_N\psi(.,t) - \psi_N(.,t)\|_{L^2(\Omega)}. \tag{13}$$

2.4.4 *En utilisant la majoration suivante, qu'on admettra*

$$\forall r \geq 1, \exists C, \forall u \in H^r(\Omega), \quad \|u - \Pi_N u\|_{L^2} + N^{-1}\|u - \Pi_N u\|_{H^1} \leq CN^{-r}\|u\|_{H^r}, \tag{14}$$

où C est une constante qui dépend de r mais pas de u, montrer que

$$\forall t \in [0,T], \quad \| \psi(.,t) - \psi_N(.,t)\|_{L^2(\Omega)} \leq C(T,V,\psi)N^{-\rho} \tag{15}$$

avec une constante $C(T,V,\psi)$ qu'on explicitera et une constante ρ dont on dira comment elle est liée à ψ.

On admettra que la solution Ψ_N du problème (8) est asymptotiquement aussi proche de ψ que ψ_N.

Question 2.5 On se place maintenant dans le cas non périodique, et on construit une approximation X_h de l'espace X par des éléments finis Lagrangiens affines associés à un maillage indexé par h.

2.5.1 *Donner également l'approximation interne générale du problème (2) dont la solution est notée ψ_h. Montrer qu'il s'agit encore d'un système de M équations à M inconnues (où M est la dimension de X_h) qui possède une solution unique telle que $\psi_h(., t = 0)$ est donnée.*

2.5.2 *Montrer que pour tout $\varphi_h \in X_h$ on a*

$$i\int_\Omega \frac{\partial(\psi - \psi_h)}{\partial t}\overline{\varphi}_h dx = a(\psi - \psi_h, \varphi_h). \tag{16}$$

2.5.3 *En introduisant la projection $\tilde{\psi}_h$ de ψ sur X_h pour le produit hermitien sur $H^1_0(\Omega; C)$, i.e.*

$$\forall \chi_h \in X_h, \quad \int_\Omega \nabla(\psi - \tilde{\psi}_h)\overline{\nabla\chi_h} = 0$$

et en choisissant $\varphi_h = \tilde{\psi}_h - \psi_h$ dans (16), montrer tout d'abord que

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_\Omega |\tilde{\psi}_h(x,t) - \psi_h(x,t)|^2 \leq [\|\frac{\partial(\psi(.,t) - \tilde{\psi}_h(.,t))}{\partial t}\|_{L^2(\Omega)} + \|V\|_{L^\infty(\Omega)}\|\psi(.,t) - \tilde{\psi}_h(.,t)\|_{L^2(\Omega)}]\| \tilde{\psi}_h(.,t) - \psi_h(.,t)\|_{L^2(\Omega)}. \tag{17}$$

2.5.4 *En déduire une estimation d'erreur du type*

$$\forall t \in [0,T], \quad \| \psi(.,t) - \psi_h(.,t)\|_{L^2(\Omega)} \leq C(T,V,\psi)h^2 \tag{18}$$

pour une constante C qu'on explicitera ; on remarquera en particulier que $\frac{\partial\tilde{\psi}_h}{\partial t}$ est la projection de $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ pour le produit hermitien de $H^1_0(\Omega; C)$.

3 : Discrétisation en espace et en temps

Question 3.1 On reste dans le cadre non périodique et l'on reprend les notations de la question 2.5. On introduit un pas de temps sur $[0,T]$ défini en découpant l'intervalle en P parties égales $\Delta t = T/P$. On introduit ensuite les temps intermédiaires $t^p = p\Delta t$. À partir de l'approximation de la solution $\psi(.,t^p)$ notée par ψ_h^p on définit ψ_h^{p+1}, par récurrence par

$$\forall \varphi_h \in X_h, \quad i\int_\Omega \frac{\psi_h^{p+1}-\psi_h^p}{\Delta t}\overline{\varphi}_h = a(\frac{\psi_h^{p+1}+\psi_h^p}{2},\varphi_h). \tag{19}$$

3.1.1 *Montrer qu'il existe une solution unique à ce problème. En choisissant $\varphi_h = \psi_h^{p+1}+\psi_h^p$, vérifier que la norme L^2 de ψ_h^p est indépendante de p.*

On introduit l'erreur de consistance $\varepsilon_h^p \in X_h$ définie par

$$\forall \varphi_h \in X_h, \quad \int_\Omega \varepsilon_h^p\overline{\varphi}_h = i\int_\Omega \frac{\psi_h(.,t^{p+1})-\psi_h(.,t^p)}{\Delta t}\overline{\varphi}_h - a(\frac{\psi_h(.,t^{p+1})+\psi_h(.,t^p)}{2},\varphi_h), \tag{20}$$

où ψ_h est la solution de l'approximation éléments finis.

3.1.2 *Écrire l'équation satisfaite par $E_h^p = \psi_h(.,t^p)-\psi_h^p$ et en choisissant $\varphi_h = E_h^{p+1}+E_h^p$, dériver une estimation sur E_h^{p+1} faisant intervenir E_h^p.*

3.1.3 *En déduire*

$$\forall q \le P, \quad \|E_h^q\|_{L^2(\Omega)} \le cT\sup_p \|\varepsilon_h^p\|_{L^2(\Omega)}. \tag{21}$$

3.1.4 *En supposant toute la régularité nécessaire en temps sur ψ_h, montrer que*

$$\forall q \le P, \quad \|E_h^q\|_{L^2(\Omega)} \le cT(\Delta t)^2. \tag{22}$$

Question 3.2 Pour le cas périodique maintenant, on va utiliser l'algorithme, connu sous le nom de Transformation de Fourier Rapide (FFT) pour proposer une discrétisation alternative en temps. Soit $\varphi_N = \sum_{\ell=-N}^N \hat{\varphi}_\ell\phi_\ell$ un élément quelconque de X_N. La transformation de Fourier rapide (resp. la transformation de Fourier rapide inverse) permet de calculer, à partir des $(\hat{\varphi}_\ell)_{\ell=-N,\dots,N}$, les $2N+1$ valeurs $\varphi_N(\xi_\ell)$ (resp. à partir des $2N+1$ valeurs $\varphi_N(\xi_\ell)$ les coefficients de Fourier $(\hat{\varphi}_\ell)_{\ell=-N,\dots,N}$) , le coût de la transformation, et son inverse étant majoré par $cN\log(N)$ alors qu'on s'attendrait à un coût en N^2.

3.2.1 *Expliquer pourquoi on s'attendrait à ce coût en N^2.*

Ayant donc à disposition les deux représentations fournies par les écritures dans la base des ϕ_k ou celle des h_i, on peut proposer le schéma dit de directions alternées

$$\psi_N^{p+1} = \exp(-iH_0\frac{\Delta t}{2})\exp(-iV\Delta t)\exp(-iH_0\frac{\Delta t}{2})\psi_N^p \tag{23}$$

qui consiste à résoudre sur un demi pas de temps le problème (9), puis sur un pas de temps le problème (10) et à nouveau sur un demi pas de temps le problème (9).

3.2.2 *Expliquer comment, grâce à l'algorithme de FFT et son inverse, cette discrétisation peut être mise en oeuvre avec un coût, a chaque itération en temps de l'ordre de $cN\log(N)$.*

3.2.3 *On introduit l'erreur de consistance* $\varepsilon_N^p \in X_N$ *par*

$$\varepsilon_N^p = \psi_N(.,t^{p+1}) - \exp(-iH_0\frac{\Delta t}{2})\exp(-iV\Delta t)\exp(-iH_0\frac{\Delta t}{2})\psi_N(.,t^p), \tag{24}$$

que l'on admettra être bornée par $C\,(\Delta t)^3$ *si la solution* ψ_N *est assez régulière en espace. Écrire l'équation satisfaite par* $E_N^p = \psi_N(.,t^p) - \psi_N^p$ *et en déduire une estimation d'erreur*

$$\forall q \leq P, \quad \|E_N^q\|_{L^2(\Omega)} \leq cT(\Delta t)^2. \tag{25}$$

4 : Contrôle

On souhaite maintenant agir sur le système pour amener la solution ψ à un temps T dans une configuration appropriée. Pour cela on dispose d'un contrôle actif, piloté par une fonction réelle $\varepsilon(t)$ qui agit sur ψ selon l'équation

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = (H + \varepsilon(t)\ \mu(x))\psi, \tag{26}$$

où μ est une fonction réelle donnée sur Ω aussi régulière que nécessaire. On supposera que, pour chaque ε, il existe une solution unique suffisamment régulière au système (26).

Partant à nouveau de la solution initiale ψ_0, on définit une cible ψ_T, et on cherche à piloter ε pour minimiser la distance $\|\psi(.,T) - \psi_T\|_{L^2}$. On est donc amené naturellement à chercher ε pour que la fonctionnelle de coût cumulé

$$J(\varepsilon) = \int_\Omega |\psi(x,T) - \psi_T(x)|^2 dx + \int_0^T \varepsilon^2(s)ds, \tag{27}$$

(où ψ est la solution de (26)) soit la plus petite possible.

Question 4.1 *Expliquer la présence des termes de cette fonctionnelle tant sur le plan de la pertinence de la modélisation que sur ce qu'ils apportent sur le plan mathématique.*

Question 4.2 *On suppose que la condition initiale* ψ_0 *est choisie de norme* L^2 *égale à 1. Dire pourquoi il est naturel alors de choisir la cible* ψ_T *également de norme 1. En utilisant ce fait, montrer que*

$$J(\varepsilon) = 2 - 2\mathcal{R}e[\int_\Omega \psi(x,T).\overline{\psi}_T(x)dx] + \int_0^T \varepsilon^2(s)ds, \tag{28}$$

où $\mathcal{R}e[.]$ *désigne la partie réelle de l'argument.*

Comme pour beaucoup d'algorithmes d'optimisation, la minimisation de J va se faire de façon itérative. Partant d'un contrôle connu ε^k et d'un état associé ψ^k, solution de (26), on va chercher ε^{k+1} de sorte que la fonctionnelle de coût J diminue, c'est à dire $J(\varepsilon^{k+1}) \leq J(\varepsilon^k)$.

Question 4.3 *Expliquer en quoi la décroissance à chaque itération est intéressante. Cela suffit-il à assurer la convergence de l'algorithme ? Dans le cadre de la minimisation d'une fonctionnelle* J *en dimension finie, citer un exemple d'algorithme qui assure la décroissance de la fonctionnelle à chaque itération, et citer un exemple d'algorithme qui ne l'assure pas a priori.*

Pour répondre à notre objectif, on calcule

$$J(\varepsilon^{k+1}) - J(\varepsilon^k) = -2\mathcal{R}e[\int_\Omega (\psi^{k+1}(x,T) - \psi^k(x,T)).\overline{\psi}_T(x)dx] + \int_0^T (\varepsilon^{k+1} + \varepsilon^k)(\varepsilon^{k+1} - \varepsilon^k)(s)ds. \quad (29)$$

On introduit maintenant l'état adjoint χ^k solution de

$$i\frac{\partial \chi^k}{\partial t} = (H + \varepsilon^k(t)\ \mu(x))\chi^k, \quad (30)$$

vérifiant $\chi^k(.,T) = \psi_T$ (bien noter qu'il s'agit d'une équation rétrograde en temps).

Question 4.4 *En considérant* $\int_0^T \int_\Omega \frac{d}{dt}(\psi^{k+1} - \psi^k)\overline{\chi^k}$*, montrer que*

$$J(\varepsilon^{k+1}) - J(\varepsilon^k) = \int_0^T (\varepsilon^{k+1} - \varepsilon^k)(s)[-2\mathcal{I}m[\int_\Omega \mu(x)\psi^{k+1}(x,s)\overline{\chi}^k(x,s)dx] + (\varepsilon^{k+1} + \varepsilon^k)(s)]ds. \quad (31)$$

Question 4.5 *Montrer que si l'on définit* ε^{k+1} *par la formule*

$$\varepsilon^{k+1}(t) = (1-\delta)\varepsilon^k(t) + \delta\mathcal{I}m[\int_\Omega \mu(x)\psi^{k+1}(x,t)\overline{\chi}^k(x,t)dx],$$

pour $\delta \in]0,2[$ *on diminue effectivement la fonctionnelle de coût* $J(\varepsilon^{k+1}) \leq J(\varepsilon^k)$*. Que se passe-t-il en cas d'égalité ?*

Corrigé

Partie 1 : Etude théorique

Réponse à la Question 1.1

En multipliant l'équation (1) par $\overline{\psi} = \psi_r - i\psi_i$, on obtient, après intégration par parties (et en remarquant que les termes de bord s'annulent)

$$i \int \frac{\partial(\psi_r + i\psi_i)}{\partial t}(\psi_r - i\psi_i) = \int_\Omega \nabla\psi\overline{\nabla\psi} + \int_\Omega V\psi\overline{\psi}$$

On remarque que l'expression à droite est réelle (on utilise le fait que V est réel) et donc la partie imaginaire de gauche (c'est à dire $\frac{1}{2}\int_\Omega \frac{\partial(\psi_r^2 + \psi_i^2)}{\partial t}$) est nulle, ce qui prouve que la norme de ψ est constante en temps.

Réponse à la Question 1.2

Il est classique d'obtenir (2) en partant de (1) en multipliant ce problème par $\overline{\varphi}$, en intégrant par rapport à Ω et en intégrant par parties le terme avec le Laplacien. Comme dans la question précédente, les termes de bord disparaissent.

La réciproque, partant du problème variationnel, dont on suppose la solution aussi régulière que l'on veut (en fait $\mathcal{C}^2$ suffit) s'obtient à nouveau par intégration par parties en choisissant tout d'abord dans (2) une fonction φ nulle sur le bord. On obtient ainsi (1) au sens faible, puis au sens des fonctions continues par exemple.

Partie 2 : Discrétisation en espace

Réponse à la Question 2.1

2.1.1 : L'approximation interne générale du problème (2) consiste à définir $\psi_{S,N} \in X_{S,N}$ telle que

$$\forall\varphi_{S,N} \in X_{S,N}, \quad i\int_\Omega \frac{\partial\psi_{S,N}}{\partial t}\overline{\varphi}_{S,N} = a(\psi_{S,N}, \varphi_{S,N}). \tag{32}$$

qui donne un système d'équations différentielles ordinaires de $N+1$ équations à $N+1$ inconnues, en choisissant pour $\varphi_{S,N}$ les éléments d'une base de $X_{S,N}$. En particulier, on prend les χ_n, et on cherche $\varphi_{S,N} = \sum_{m=1}^N \hat{\psi}_m\chi_m$, et on obtient, grâce à l'orthogonalité des χ_n

$$i\frac{d\hat{\psi}_m}{dt} = \lambda_m\hat{\psi}_m$$

qui s'intègre facilement en

$$\hat{\psi}_m(t) = \hat{\psi}_m(0)\exp(-i\,\lambda_m t).$$

La solution est donc

$$\varphi_{S,N}(.,t) = \sum_{m=1}^N \exp(-i\,\lambda_m t)\hat{\psi}_m(0)\chi_m. \tag{33}$$

Réponse à la Question 2.2

2.2.1 : L'approximation interne générale du problème (2) consiste à définir maintenant $\psi_N \in X_N$ telle que

$$\forall \varphi_N \in X_N, \quad i\int_\Omega \frac{\partial \psi_N}{\partial t}\overline{\varphi}_N = a(\psi_N, \varphi_N), \tag{34}$$

qui donne encore un système d'équations différentielles ordinaires de $N+1$ équations à $N+1$ inconnues, en choisissant pour φ_N les éléments de la base de X_N des ϕ_m. Ce système n'est maintenant plus diagonal (à cause de V) mais, néanmoins, il définit une solution unique telle que $\psi_N(., t=0)$ est donnée.

2.2.2 : On remarque tout d'abord que

$$\begin{aligned}
(\phi_n, \phi_m)_N &= \sum_{\ell=-N}^{N} \exp(in\xi_\ell)\exp(-im\xi_\ell)\frac{2\pi}{2N+1} \\
&= \sum_{\ell=-N}^{N} \exp(i(n-m)\xi_\ell)\frac{2\pi}{2N+1} \\
&= \sum_{\ell=-N}^{N} \exp(i(n-m)(\frac{2\ell\pi}{2N+1})\frac{2\pi}{2N+1} \\
&= \exp(-Ni\frac{2(n-m)\pi}{2N+1})\sum_{\ell=0}^{2N}[\exp(i(\frac{2(n-m)\pi}{2N+1})]^\ell\,\frac{2\pi}{2N+1}
\end{aligned} \tag{35}$$

où le membre de droite est une somme géométrique qui est égale à 2π si $n=m$ et est nulle sinon : on a donc bien l'égalité demandée (6) et (7) en découle par combinaison linéaire.

2.2.3 : Le nouveau problème (8) est tout à fait similaire à (34) (cela reste un système d'équations différentielles ordinaires de $N+1$ équations à $N+1$ inconnues) et il possède une solution unique telle que $\Psi_N(., t=0)$ est donnée.

2.2.4 : En utilisant pour fonction test $\varphi_N = \Psi_N(., t)$ on obtient comme dans le cas sans intégration numérique que la norme discrète $(\Psi_N(., t), \Psi_N(., t))_N$ est constante en temps, ce qui, avec (7), donne la conservation de la norme L^2 de $\Psi_N(., t)$.

Réponse à la Question 2.3

2.3.1 : On a déjà remarqué que la présence de V était celle qui empéchait le système d'équations d'être diagonal. Il est en effet facile de vérifier que pour (9) les fonctions propres de l'opérateur de Laplace sont les ϕ_k, correspondant aux valeurs propres k^2. Dans cette base le système est donc diagonal, peut être résolu à la main et donne, en suivant (33)

$$\varphi_N(x,t) = \sum_{m=0}^{N} \exp(-i\,m^2t)\hat{\psi}_m(0)e^{imx}. \tag{36}$$

D'où la notation

$$\psi_N(., t) = \exp(-i\,(-\Delta)\,t)\psi_{0,N} = \exp(-iH_0t)\psi_{0,N}.$$

2.3.2 : Maintenant il est facile de voir aussi que, pour le produit hermitien discret, on a

$$(Vh_i, \varphi_N)_N = V(\xi_i)(h_i, \varphi_N)_N,$$

puisque h_i est nul en tous les ξ_j, $j \neq i$. On tient donc une base de vecteurs propres dans laquelle le système différentiel issu de (10) est diagonal. D'où la notation

$$\psi_N(x,t) = \sum_{m=1}^{N} \exp(-i\,V(\xi_m)t)\hat{\psi}_m(0)h_m(x) = \exp(-iVt)\psi_{0,N}(x).$$

Réponse à la Question 2.4

2.4.1 : La discrétisation étant interne, c'est à dire $X_N \subset H^1$, on peut prendre $\varphi = \varphi_N$ dans (2), et, par soustraction avec (34) on obtient (12).

2.4.2 : Comme on l'a déjà remarqué, les ϕ_k forment un système orthogonal pour le produit hermitien L^2 mais aussi pour le produit hermitien de $H^1_\#(\Omega_\#;\mathbb{C})$, les opérateurs de projection sur X_N pour le produit hermitien de $L^2(\Omega_\#)$ et de $H^1_\#(\Omega_\#;\mathbb{C})$ coïncident donc avec la troncature de Fourier.

2.4.3 : Avec le choix $\varphi_N = \Pi_N\psi - \psi_N$ dans (12), on obtient tout d'abord

$$i\int_\Omega \frac{\partial(\psi-\psi_N)}{\partial t}\overline{\Pi_N\psi-\psi_N}dx = a(\psi-\psi_N, \Pi_N\psi-\psi_N),$$

d'ou l'on déduit

$$\begin{aligned}
i\int_\Omega \frac{\partial(\Pi_N\psi-\psi_N)}{\partial t}\overline{\Pi_N\psi-\psi_N}dx &= \int_\Omega \nabla(\Pi_N\psi-\psi_N)\overline{\nabla(\Pi_N\psi-\psi_N)} + \int_\Omega V(\psi-\psi_N)\overline{(\Pi_N\psi-\psi_N)} \\
&= \int_\Omega \nabla(\Pi_N\psi-\psi_N)\overline{\nabla(\Pi_N\psi-\psi_N)} + \int_\Omega V(\Pi_N\psi-\psi_N)\overline{(\Pi_N\psi-\psi_N)} \\
&\qquad + \int_\Omega V(\psi-\Pi_N\psi)\overline{(\Pi_N\psi-\psi_N)}. \qquad (37)
\end{aligned}$$

Donc, en prenant la partie imaginaire de cette équation (on remarque en particulier que dans le terme de droite, seule la dernière ligne contribue), on obtient bien (13).

2.4.4 : Par intégration on obtient tout d'abord

$$\forall t \in [0,T], \quad \|\Pi_N\psi(.,t) - \psi_N(.,t)\|_{L^2} \leq C\|V\|_{L^2(0,T;L^\infty(\Omega))}\|\Pi_N\psi-\psi\|_{L^2(\Omega\times[0,T])}$$

si l'on suppose que $\psi_N(.,0) = \Pi_N\psi(.,0)$

En utilisant l'estimation (14), on obtient bien (15) avec $C(T,V,\psi) = (1 + C\|V\|_{L^2(0,T;L^\infty(\Omega))})\|\psi\|_{L^2(0,T;H^\rho(\Omega))}$. La constante ρ est liée à la régularité de ψ en espace.

Réponse à la Question 2.5

2.5.1 : L'approximation interne générale du problème (2) consiste cette fois à définir $\psi_h \in X_h$ telle que

$$\forall\varphi_h \in X_h, \quad i\int_\Omega \frac{\partial\psi_h}{\partial t}\overline{\varphi}_h = a(\psi_h,\varphi_h). \qquad (38)$$

qui conduit également à un système d'équations différentielles ordinaires de M équations à M inconnues, en choisissant pour φ_h les éléments d'une base de X_h (par exemple celle des "*fonctions chapeaux*"). La matrice de masse n'est pas diagonale. Si on peut bien toujours résoudre le système, il n'est plus question de pouvoir le faire à la main.

2.5.2 : La démarche pour obtenir (16) est la même que pour l'approximation (12).

2.5.3 : On injecte maintenant dans cette égalité $\varphi_h = \tilde{\psi}_h - \psi_h$

$$i\int_\Omega \frac{\partial(\psi - \psi_h)}{\partial t}\overline{\tilde{\psi}_h - \psi_h}dx = \int_\Omega \nabla(\tilde{\psi}_h - \psi_h)\overline{\nabla(\tilde{\psi}_h - \psi_h)} + \int_\Omega V(\psi - \psi_h)\overline{(\tilde{\psi}_h - \psi_h)} \tag{39}$$

où l'on a tout de suite utilisé le fait que $\tilde{\psi}_h$ est une projection particulière au niveau du terme en gradient-gradient. On en tire

$$i\int_\Omega \frac{\partial(\tilde{\psi}_h - \psi_h)}{\partial t}\overline{\tilde{\psi}_h - \psi_h}dx = i\int_\Omega \frac{\partial(\tilde{\psi}_h - \psi)}{\partial t}\overline{\tilde{\psi}_h - \psi_h}dx + \int_\Omega \nabla(\tilde{\psi}_h - \psi_h)\overline{\nabla(\tilde{\psi}_h - \psi_h)} + \int_\Omega V(\psi - \psi_h)\overline{(\tilde{\psi}_h - \psi_h)} \tag{40}$$

et en prenant à nouveau la partie imaginaire, on obtient (17). On remarque que l'on a un terme de plus par rapport à la question 2.4.

2.5.4 : Cela donne

$$\forall t \in [0,T], \quad \|\tilde{\psi}_h(.,t) - \psi_h(.,t)\|_{L^2} \leq C[\|\frac{\partial(\tilde{\psi}_h - \psi)}{\partial t}\|_{L^1(0,T;L^2(\Omega))} + \|V\|_{L^2(0,T;L^\infty(\Omega))}\|\tilde{\psi}_h - \psi\|_{L^2(\Omega\times[0,T])}]$$

si l'on suppose que $\psi_h(.,0) = \tilde{\psi}_h(.,0)$. Le fait que $\frac{\partial\tilde{\psi}_h}{\partial t}$ est la projection de $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ pour le produit hermitien de $H_0^1(\Omega;\mathbb{C})$ découle simplement du fait que les opérations de dérivation par rapport au temps et les intégrations en espace commutent, on obtient alors,

$$\|\tilde{\psi}_h - \psi\|_{L^2(\Omega)} \leq ch^2\|\psi\|_{H^2(\Omega)}$$

et

$$\|\frac{\partial(\tilde{\psi}_h - \psi)}{\partial t}\|_{L^2(\Omega)} \leq ch^2\|\frac{\partial\psi}{\partial t}\|_{H^2(\Omega)}$$

ce qui conduit à (18) avec $C(T,V,\psi) = (1 + c(\|\frac{\partial\psi}{\partial t}\|_{L^1(0,T,H^2(\Omega))} + \|V\|_{L^2(0,T;L^\infty(\Omega))}\|\psi\|_{L^2(0,T;H^2(\Omega))}))$.

Partie 3 : Discrétisation en espace et en temps

Réponse à la Question 3.1

3.1.1 : On réécrit le problème en isolant les inconnues à gauche

$$\forall\varphi_h \in X_h, \quad \frac{i}{\Delta t}\int_\Omega \psi_h^{p+1}\overline{\varphi}_h - \frac{1}{2}a(\psi_h^{p+1},\varphi_h) = \frac{i}{\Delta t}\int_\Omega \psi_h^p\overline{\varphi}_h + \frac{1}{2}a(\psi_h^p,\varphi_h), \tag{41}$$

qui est un problème posé dans l'espace X_h de dimension M. En prenant tour à tour pour φ_h les fonctions "chapeaux" on obtient un système linéaire carré de M équations à M inconnues qui est évidemment inversible (puisque $\frac{i}{\Delta t}\int_\Omega \psi_h^{p+1}\overline{\psi}_h^{p+1} - \frac{1}{2}a(\psi_h^{p+1},\psi_h^{p+1}) \neq 0$). En choisissant $\varphi_h = \psi_h^{p+1} + \psi_h^p$ dans (19) et par un argument maintenant classique sur la partie imaginaire de ce que l'on obtient, il résulte que

$$\mathcal{R}e[\int_\Omega (\psi_h^{p+1} - \psi_h^p)\overline{(\psi_h^{p+1} + \psi_h^p)}] = 0$$

et donc

$$\|\psi_h^{p+1}\|_{L^2(\Omega)} = \|\psi_h^p\|_{L^2(\Omega)}.$$

3.1.2 : Par simple soustraction on obtient l'équation satisfaite par $E_h^p = \psi_h(.,t^p) - \psi_h^p$

$$\forall \varphi_h \in X_h, \quad i\int_\Omega \frac{E_h^{p+1} - E_h^p}{\Delta t}\overline{\varphi}_h = a(\frac{E_h^{p+1} + E_h^p}{2}, \varphi_h) + \int_\Omega \varepsilon_h^p \overline{\varphi}_h, \tag{42}$$

et en choisissant $\varphi_h = E_h^{p+1} + E_h^p$ dans cette équation, et en prenant, une fois de plus, la partie imaginaire on obtient

$$\|E_h^{p+1}\|^2_{L^2(\Omega)} - \|E_h^p\|^2_{L^2(\Omega)} \leq \Delta t \|\varepsilon_h^p\|_{L^2(\Omega)} \|E_h^{p+1} + E_h^p\|_{L^2(\Omega)}.$$

On en déduit facilement

$$\|E_h^{p+1}\|_{L^2(\Omega)} \leq \|E_h^p\|_{L^2(\Omega)} + \Delta t \|\varepsilon_h^p\|_{L^2(\Omega)}.$$

3.1.3 : En sommant les inégalités ci-dessus, on a

$$\forall q \leq P, \quad \|E_h^q\|_{L^2(\Omega)} \leq \sum_{p=1}^q \Delta t \|\varepsilon_h^p\|_{L^2(\Omega)}$$

ce qui donne (21).

3.1.4 : Dans la foulée on obtient (22) en remarquant que l'erreur de consistance est d'ordre 2 en temps.

Réponse à la Question 3.2

3.2.1 : Le calcul des $2N+1$ valeurs $\varphi_N(\xi_\ell)$ à partir des $(\hat{\varphi}_\ell)_{\ell=-N,\dots,N}$, est une opération linéaire. Elle peut donc s'écrire sous forme matricielle. Il n'y a pas de raison que cette matrice soit creuse, et un calcul simple permet de s'en convaincre. Le coût de la multiplication d'un vecteur par la matrice en question est donc exactement de $(2N+1)^2$. Il en est de même pour l'inverse. L'algorithme de transformation de Fourier rapide permet de réduire donc largement ces passages d'une représentation à l'autre.

3.2.2 : La mise en oeuvre du schéma de directions alternées se fait par un passage d'une représentation à l'autre en utilisant l'algorithme de FFT. En effet, on a déjà remarqué que la base de Fourier est le bon cadre pour la propagation du Laplacien $\exp(-iH_0\frac{\Delta t}{2})$. En revanche, l'espace des valeurs aux points ξ_i est le bon cadre pour la propagation du terme avec le potentiel $\exp(-iV\Delta t)$ car le propagateur y est diagonal.

3.2.3 : Avec l'expression de l'erreur de consistance ε_N^p et par soustraction de cette définition avec (23), on obtient

$$\left|E_N^{p+1} - \exp(-iH_0\frac{\Delta t}{2})\exp(-iV\Delta t)\exp(-iH_0\frac{\Delta t}{2})E_N^p\right| \leq c(\Delta t)^3, \tag{43}$$

par l'hypothèse faite sur la taille de l'erreur de consistance. En prenant les normes $L^2(\Omega)$ on obtient par inégalité triangulaire

$$\|E_N^{p+1}\|_{L^2} \leq \|\exp(-iH_0\frac{\Delta t}{2})\exp(-iV\Delta t)\exp(-iH_0\frac{\Delta t}{2})E_N^p\|_{L^2} + c(\Delta t)^3. \tag{44}$$

On remarque maintenant que les opérateurs $\exp(-iH_0\frac{\Delta t}{2})$ et $\exp(-iV\Delta t)$ préservant la norme L^2, on a donc

$$\|E_N^{p+1})\|_{L^2} \leq \|E_N^p\|_{L^2} + c(\Delta t)^3, \tag{45}$$

et donc (25) en sommant le tout.

Partie 4 : Contrôle

Réponse à la Question 4.1

Le premier terme dans J tient compte de la distance à la cible ψ_T que l'on souhaite minimiser, alors que le second prend en compte le fait qu'on cherche à réaliser cette minimisation à un coût également minimal. La fonctionnelle de coût est quadratique en la solution et ε ce qui simplifie l'expression du gradient qui caractérise l'état optimal.

Réponse à la Question 4.2 La solution initiale étant de norme L^2 égale à 1, et la propagation par le potentiel $H+\varepsilon(t)\ \mu(x)$ préservant la norme, il est naturel de demander que la cible ψ_T soit de norme 1. Un simple développement montre que

$$\int_\Omega |\psi(x,T)-\psi_T(x)|^2 dx = 2 - 2\mathcal{R}e[\int_\Omega \psi(x,T).\overline{\psi}_T(x)dx]$$

Réponse à la Question 4.3 La décroissance à chaque itération permet d'assurer une certaine stabilité à la méthode itérative. Si la fonctionnelle J est convexe, cela permet d'assurer qu'on se dirige vers le minimum de J mais cela ne permet en aucun cas d'assurer qu'on va atteindre le minimum ni un minimum local. En particulier, la suite stationnaire $\varepsilon^{k+1} = \varepsilon^k$ est admissible pour une décroissance de J !

Dans le cadre de la minimisation d'une fonctionnelle J en dimension finie, la méthode du gradient à pas optimal est un exemple d'algorithme qui assure la décroissance de la fonctionnelle à chaque itération, par contre dans la méthode du gradient à pas fixe on peut ne pas avoir décroissance.

Réponse à la Question 4.4

Avec les notations on obtient

$$\begin{aligned}
(\psi^{k+1}(.,T)-\psi^k(.,T)).\overline{\psi}_T &= (\psi^{k+1}(.,T)-\psi^k(.,T)).\overline{\chi}^k(.,T)\\
&= \int_0^T \frac{\partial}{\partial t}[(\psi^{k+1}(.,t)-\psi^k(.,t)).\overline{\chi}^k(.,t)]dt + (\psi^{k+1}(.,0)-\psi^k(.,0)).\overline{\chi}^k(.,0)\\
&= \int_0^T \frac{\partial(\psi^{k+1}(.,t)-\psi^k(.,t))}{\partial t}\overline{\chi}^k(.,t)dt + \int_0^T \frac{\partial\overline{\chi}^k(.,t)}{\partial t}(\psi^{k+1}(.,t)-\psi^k(.,t))dt
\end{aligned}$$

car $\psi^{k+1}(.,0)-\psi^k(.,0)=0$. En utilisant les équations définissant ψ et χ on obtient

$$\begin{aligned}
i(\psi^{k+1}(.,T)-\psi^k(.,T)).\overline{\psi}_T &= \int_0^T (H+\varepsilon^{k+1}\mu)\psi^{k+1}(.,t)-(H+\varepsilon^k\mu)\psi^k(.,t))\overline{\chi}^k(.,t)dt\\
&\qquad - \int_0^T (H+\varepsilon^k\mu)\overline{\chi}^k(.,t)(\psi^{k+1}(.,t)-\psi^k(.,t))dt\\
&= \int_0^T (\varepsilon^{k+1}-\varepsilon^k)\mu\psi^{k+1}(.,t)\overline{\chi}^k(.,t)
\end{aligned}$$

d'où découle (31) d'après (29).

Réponse à la Question 4.5 Un simple calcul montre que

$$J(\varepsilon^{k+1})-J(\varepsilon^k) = -\delta(2-\delta)\int_0^T (\varepsilon^k - \mathcal{I}m[\int_\Omega \mu(x)\psi^{k+1}(x,s)\overline{\chi}^k(x,s)dx])^2 ds$$

qui est donc négatif ou nul pour $\delta \in]0, 2[$.

En cas d'égalité, cela signifie que $\varepsilon^k(t) - \mathcal{I}m[\int_\Omega \mu(x)\psi^{k+1}(x,t)\overline{\chi}^k(x,t)dx] = 0$ et, en revoyant (31), on s'aperçoit que ε^k annule le gradient de J par rapport à ε et donc on est sur un minimum ou un point-selle de J.