Contrôle optimal d'une équation de Schrödinger

9 octobre 2014

1 Présentation du problème

On considère un système $x(t) \in \mathbb{C}^2$ dont l'évolution est décrite par l'équation :

$$\dot{x}(t) = i\,(A + c(t)B)\,x(t),$$

où A et B sont deux matrices réelles symétriques, et c une fonction scalaire réelle.
Il s'agît d'une équation de Schrödinger, le système $x(t)$ correspond à un système dit "quantique à 2 niveaux" : les grandeurs $|x_1|^2$ et $|x_2|^2$ décrivent la probabilité pour le système de se trouver sur l'un des deux niveaux. Le contrôle $c(t)$ est un champ électrique délivré par un laser. Il modifie l'évolution du système de façon non-linéaire : il ne se trouve pas en terme de droite de l'équation, mais multiplie l'état. On parle parfois de contrôle "bilinéaire". D'autres exemples en physique donnent lieu à de telles sistuations : l'équation d'une poutre subissant un force, où encore le transport d'un fluide dont on peut contrôler la vitesse.
On montre facilement que la norme ℓ^2 de x est conservée au cours du temps :

$$\frac{d}{dt}(\|x(t)\|^2) = 2\Re\langle x(t), \dot{x}(t)\rangle = 2\Re\langle x(t), i\,(A + c(t)B)\,x(t)\rangle = 0.$$

On suppose que le système par d'un état x_0, de norme $\|x_0\| = 1$ au temps $t = 0$ et on cherche un contrôle c qui permet d'approcher une cible x_{ref} au temps T. On a donc recours à une fonctionnelle du type :

$$J(c) = 1/2\|x(T) - x_{ref}\|^2 + \frac{\alpha}{2}\int_0^T c(t)^2 dt,$$

qui dans notre cas se simplifie en :

$$J(c) = -\langle x(T), x_{ref}\rangle + \frac{\alpha}{2}\int_0^T c(t)^2 dt + 2.$$

Le '2' ne modifiant pas le problème, on l'omet par la suite.

Le but de ce TP est simplement de chercher un contrôle optimal par une méthode de gradient.

2 Discrétisation

On se donne une discrétisation en temps $(t_n)_{n=0,\cdots,N}$, $t_n = n\Delta t$, $T = N\Delta t$. Pour l'équation d'évolution, on utilise la discrétisation suivante (dite du "splitting d'opérateur") :

$$x_{n+1} = \exp(iA\Delta t)\exp(ic_n B\Delta t)x_n.$$

Question 1 : expliquer pourquoi cette discrétisation est consistante avec l'équation de Schrödinger et pourquoi elle conserve également la norme.

ATTENTION : en Matlab, l'exponentielle de matrice se code par la commande "expm"

Pour la fonctionnelle, on définit :

$$J_{\Delta t}(c) = -\langle x_N, x_{ref} \rangle + \frac{\alpha}{2} \sum_{n=0}^{N-1} c_n^2 \Delta t.$$

Question 2 : calculer le système d'optimalité correspondant. En déduire le gradient de $J_{\Delta t}(c)$.

3 Implémentation de la méthode du gradient

On se donne les valeurs numériques suivantes :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix},\ B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

et $T = 10$, $\alpha = 1$, $N = 10^3$.

Question 3 : Implémenter une méthode de gradient à pas constant. Pour se faire, une structure pratique est

```
function tpGradient

  ...

end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Sous-fonctions
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function x=prop(N,x0,A,B,c,dt)

  ...

end
%--------------------------------------
function y=retro(N,xf,A,B,c,dt)

  ...

end
%--------------------------------------
function J=cost(x,xf,alpha,dt,c)
J=-real(x(:,end)'*xf)-.5*alpha*dt*c*c';
end
%--------------------------------------
function gradJ=Grad(c,N,alpha,y,x,A,B,dt)
gradJ=0*c;

for n=1:N-1
gradJ(1,n)= ...
end

end
%--------------------------------------
```