

Développement micro-macro et précision uniforme pour le modèle de Bloch

Brigitte Bidégaray-Fesquet^{1,2} Clément Jourdana¹
Léopold Trémant^{1,3}

¹Laboratoire Jean Kuntzmann, Univ. Grenoble-Alpes

²CNRS

³Grenoble INP, Ensimag



CANUM, 15 juin 2022



Sommaire

- 1 Présentation du modèle de Bloch
- 2 Développement micro-macro
- 3 Application numérique

Sommaire

- 1 **Présentation du modèle de Bloch**
- 2 Développement micro-macro
- 3 Application numérique

Le modèle de Bloch

Équation sur la matrice densité ρ dans une boîte quantique

$$\varepsilon^2 \partial_t \rho_{nm}(t) = \underbrace{-(\gamma_{nm} + i\omega_{nm})}_{\Omega_{nm}} \rho_{nm}(t) + i\varepsilon \phi_{t/\varepsilon^2} [p, \rho(t)]_{nm}$$

- ρ_{nn} population (probabilité d'être dans l'état n)
- ρ_{nm} cohérences (transitions entre les états n et m)
- $\omega_{nm} = \omega_m - \omega_n$ énergie de transition entre n et m
- $\gamma_{nm} = \gamma_{mn}$ relaxation sur les cohérences
- ϕ_τ champ électrique
- $p_{nm} = p_{mn}^*$ matrice de polarisabilité
- ε^2 durée caractéristique

Populations et cohérences



B. Bidégaray-Fesquet, F. Castella, P. Degond. *From Bloch model to the rate equations*. Discrete & Continuous Dynamical Systems, 2004

$$\partial_t \rho_{nn} = \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} \sum_{k \neq n} (p_{nk} \rho_{kn} - p_{kn} \rho_{nk})$$

$$\partial_t \rho_{nm} = \frac{\Omega_{nm}}{\varepsilon^2} \rho_{nm} + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} p_{nm} (\rho_{mm} - \rho_{nn}) + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} (p_{nk} \rho_{km} - p_{km} \rho_{nk})$$

Conditions initiales : $\rho_{nn}(0) = \mathcal{O}(1)$, $\rho_{nm}(0) = 0$.

Forme intégrale sur les cohérences

$$\begin{aligned} \rho_{nm}(t) &= \frac{i}{\varepsilon} p_{nm} \int_0^t e^{\frac{t-s}{\varepsilon^2} \Omega_{nm}} \phi_{s/\varepsilon^2} (\rho_{mm}(s) - \rho_{nn}(s)) ds \\ &+ \frac{i}{\varepsilon} \int_0^t e^{\frac{t-s}{\varepsilon^2} \Omega_{nm}} \phi_{s/\varepsilon^2} (p_{nk} \rho_{km}(s) - p_{km} \rho_{nk}(s)) ds \end{aligned}$$

Populations et cohérences



B. Bidégaray-Fesquet, F. Castella, P. Degond. *From Bloch model to the rate equations*. Discrete & Continuous Dynamical Systems, 2004

$$\partial_t \rho_{nn} = \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} \sum_{k \neq n} (p_{nk} \rho_{kn} - p_{kn} \rho_{nk})$$

$$\partial_t \rho_{nm} = \frac{\Omega_{nm}}{\varepsilon^2} \rho_{nm} + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} p_{nm} (\rho_{mm} - \rho_{nn}) + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} (p_{nk} \rho_{km} - p_{km} \rho_{nk})$$

Conditions initiales : $\rho_{nn}(0) = \mathcal{O}(1)$, $\rho_{nm}(0) = 0$.

Forme intégrale sur les cohérences

$$\begin{aligned} \rho_{nm}(t) &= \frac{i}{\varepsilon} p_{nm} \int_0^t e^{\frac{t-s}{\varepsilon^2} \Omega_{nm}} \phi_{s/\varepsilon^2} (\rho_{mm}(s) - \rho_{nn}(s)) ds \\ &+ \frac{i}{\varepsilon} \int_0^t e^{\frac{t-s}{\varepsilon^2} \Omega_{nm}} \phi_{s/\varepsilon^2} (p_{nk} \rho_{km}(s) - p_{km} \rho_{nk}(s)) ds \end{aligned}$$

Populations et cohérences



B. Bidégaray-Fesquet, F. Castella, P. Degond. *From Bloch model to the rate equations*. Discrete & Continuous Dynamical Systems, 2004

$$\partial_t \rho_{nn} = \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} \sum_{k \neq n} (p_{nk} \rho_{kn} - p_{kn} \rho_{nk})$$

$$\partial_t \rho_{nm} = \frac{\Omega_{nm}}{\varepsilon^2} \rho_{nm} + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} p_{nm} (\rho_{mm} - \rho_{nn}) + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} (p_{nk} \rho_{km} - p_{km} \rho_{nk})$$

Conditions initiales : $\rho_{nn}(0) = \mathcal{O}(1)$, $\rho_{nm}(0) = 0$.

Forme intégrale sur les cohérences

$$\begin{aligned} \rho_{nm}(t) &= \frac{i}{\varepsilon} p_{nm} \int_0^t e^{\frac{t-s}{\varepsilon^2} \Omega_{nm}} \phi_{s/\varepsilon^2} (\rho_{mm}(s) - \rho_{nn}(s)) ds \\ &+ \frac{i}{\varepsilon} \int_0^t e^{\frac{t-s}{\varepsilon^2} \Omega_{nm}} \phi_{s/\varepsilon^2} (p_{nk} \rho_{km}(s) - p_{km} \rho_{nk}(s)) ds \end{aligned}$$

Populations et cohérences



B. Bidégaray-Fesquet, F. Castella, P. Degond. *From Bloch model to the rate equations*. Discrete & Continuous Dynamical Systems, 2004

$$\partial_t \rho_{nn} = \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} \sum_{k \neq n} (p_{nk} \rho_{kn} - p_{kn} \rho_{nk})$$

$$\partial_t \rho_{nm} = \frac{\Omega_{nm}}{\varepsilon^2} \rho_{nm} + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} p_{nm} (\rho_{mm} - \rho_{nn}) + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} (p_{nk} \rho_{km} - p_{km} \rho_{nk})$$

Conditions initiales : $\rho_{nn}(0) = \mathcal{O}(1)$, $\rho_{nm}(0) = 0$.

Forme intégrale sur les cohérences

$$\begin{aligned} \rho_{nm}(t) = & i\varepsilon p_{nm} \int_0^{t/\varepsilon^2} e^{\sigma \Omega_{nm}} \phi_{t/\varepsilon^2 - \sigma} (\rho_{mm}(t - \varepsilon^2 \sigma) - \rho_{nn}(t - \varepsilon^2 \sigma)) d\sigma \\ & + i\varepsilon \int_0^{t/\varepsilon^2} e^{\sigma \Omega_{nm}} \phi_{t/\varepsilon^2 - \sigma} (p_{nk} \rho_{km}(t - \varepsilon^2 \sigma) - p_{km} \rho_{nk}(t - \varepsilon^2 \sigma)) d\sigma \end{aligned}$$

Populations et cohérences



B. Bidégaray-Fesquet, F. Castella, P. Degond. *From Bloch model to the rate equations*. Discrete & Continuous Dynamical Systems, 2004

$$\partial_t \rho_{nn} = \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} \sum_{k \neq n} (p_{nk} \rho_{kn} - p_{kn} \rho_{nk})$$

$$\partial_t \rho_{nm} = \frac{\Omega_{nm}}{\varepsilon^2} \rho_{nm} + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} p_{nm} (\rho_{mm} - \rho_{nn}) + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} (p_{nk} \rho_{km} - p_{km} \rho_{nk})$$

Conditions initiales : $\rho_{nn}(0) = \mathcal{O}(1)$, $\rho_{nm}(0) = 0$.

Forme intégrale sur les cohérences

$$\begin{aligned} \rho_{nm}(t) = & i\varepsilon p_{nm} \int_0^{t/\varepsilon^2} e^{\sigma \Omega_{nm}} \phi_{t/\varepsilon^2 - \sigma} (\rho_{mm}(t - \varepsilon^2 \sigma) - \rho_{nn}(t - \varepsilon^2 \sigma)) d\sigma \\ & + i\varepsilon \int_0^{t/\varepsilon^2} e^{\sigma \Omega_{nm}} \phi_{t/\varepsilon^2 - \sigma} (p_{nk} \rho_{km}(t - \varepsilon^2 \sigma) - p_{km} \rho_{nk}(t - \varepsilon^2 \sigma)) d\sigma \end{aligned}$$

Populations et cohérences



B. Bidégaray-Fesquet, F. Castella, P. Degond. *From Bloch model to the rate equations*. Discrete & Continuous Dynamical Systems, 2004

$$\partial_t \rho_{nn} = \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} \sum_{k \neq n} (p_{nk} \rho_{kn} - p_{kn} \rho_{nk})$$

$$\partial_t \rho_{nm} = \frac{\Omega_{nm}}{\varepsilon^2} \rho_{nm} + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} p_{nm} (\rho_{mm} - \rho_{nn}) + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} (p_{nk} \rho_{km} - p_{km} \rho_{nk})$$

Conditions initiales : $\rho_{nn}(0) = \mathcal{O}(1)$, $\rho_{nm}(0) = 0$.

Forme intégrale sur les cohérences

$$\rho_{nm}(t) = i\varepsilon p_{nm} \left(\int_0^{t/\varepsilon^2} e^{\sigma \Omega_{nm}} \phi_{t/\varepsilon^2 - \sigma} d\sigma \right) (\rho_{mm}(t) - \rho_{nn}(t)) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Modèle asymptotique sur les populations

$$\rho_{nm}^\#(t) = i\varepsilon p_{nm} \left(\int_0^{t/\varepsilon^2} e^{\sigma\Omega_{nm}} \phi_{t/\varepsilon^2 - \sigma} d\sigma \right) (\rho_{mm}^\#(t) - \rho_{nn}^\#(t))$$

On étudie le modèle asymptotique sur les populations

$$\partial_t \rho_{nn}^\#(t) = \sum_{k \neq n} \Psi_{kn} \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right) (\rho_{kk}^\#(t) - \rho_{nn}^\#(t))$$

$$\Psi_{kn}(\tau) = 2|p_{kn}|^2 \phi_\tau \int_0^\tau \phi_{\tau-\sigma} \operatorname{Re}(e^{\sigma\Omega_{kn}}) d\sigma$$

Par exemple,

$$\phi_\tau = \cos(\omega_0\tau), \quad \Omega_{nm} = -\gamma_{nm} + i\omega_{nm}$$

$$\Psi_{nm}(\tau) = 2 \cos(\omega_0\tau) \int_0^\tau e^{\sigma\gamma_{nm}} \cos(\omega_{nm}\sigma) \cos(\omega_0(\tau - \sigma)) d\sigma$$

Comment résoudre ce nouveau problème?

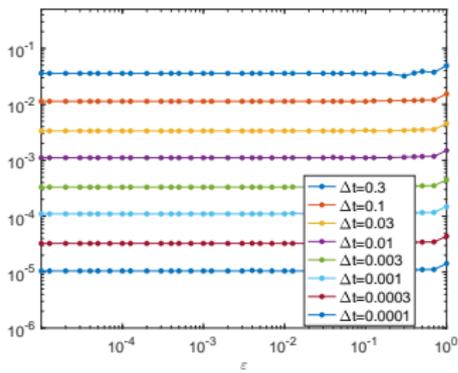
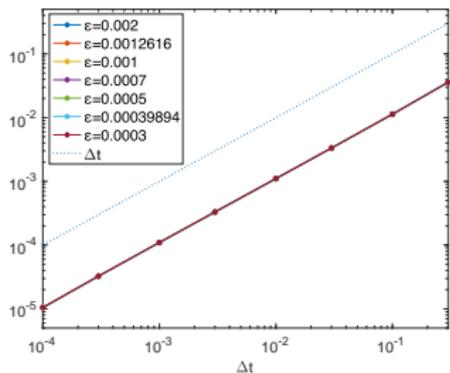
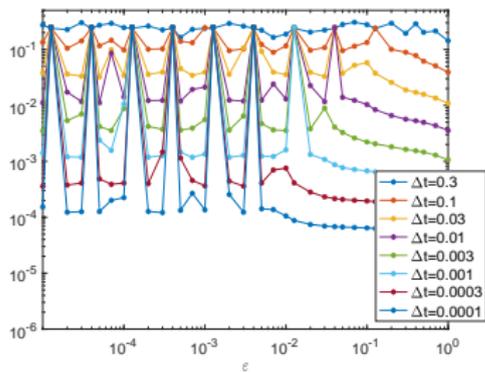
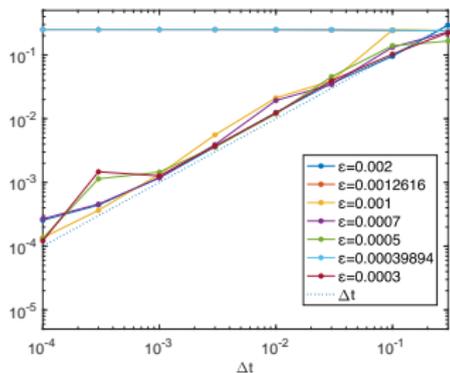
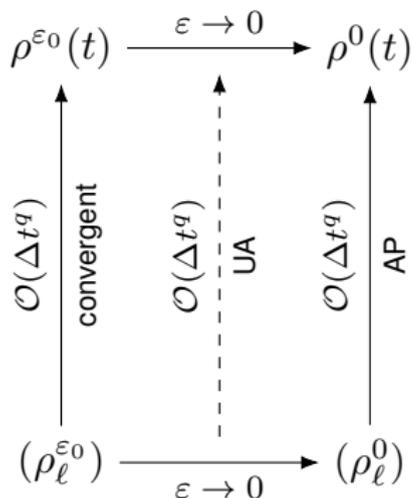


Figure: Erreur L^∞ en fonction de Δt (à gauche) et de ε (à droite) avec Euler explicite sur le système d'origine (en haut) et sur notre système micro-macro d'ordre 1 (en bas).

Notions de convergence



Définition – Ordres de convergence

On dit qu'une méthode d'ordre q est *uniformément précise* (UA) si son ordre de convergence uniforme n'est pas réduit, i.e. si

$$\sup_{0 < \varepsilon \leq \varepsilon_0} \max_{0 \leq \ell \leq N} |\rho^\varepsilon(t_\ell) - \rho_\ell^\varepsilon| = \mathcal{O}(\Delta t^q).$$

On dit qu'elle *préserve l'asymptote* (AP) si

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \max_{0 \leq \ell \leq N} |\rho^\varepsilon(t_\ell) - \rho_\ell^\varepsilon| = \mathcal{O}(\Delta t^q).$$

Ces notions peuvent parfois dépendre des conditions initiales.

Sommaire

1 Présentation du modèle de Bloch

2 Développement micro-macro

3 Application numérique

Cadre d'étude

Problème avec forçage exponentiel,

$$\partial_t u^\varepsilon(t) = a_{t/\varepsilon} u^\varepsilon(t), \quad u^\varepsilon(0) = u_0.$$

où $\tau \mapsto a_\tau$ est un opérateur à dynamique exponentielle

$$a_\tau = \sum_{\substack{\alpha \in \mathbb{Z}^r \\ m \in \mathbb{N}}} \hat{a}_{\alpha, m} e^{(i\alpha \cdot \omega - m)\tau}$$

pour un vecteur de fréquences $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_r)$ non résonant,

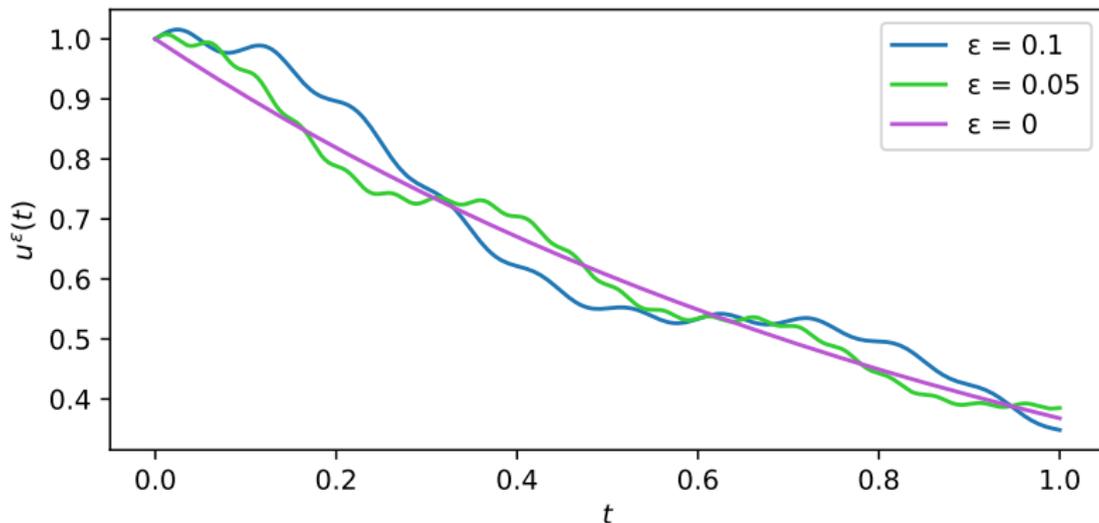
$$\omega^\perp = \{\alpha \in \mathbb{Z}^r, \alpha \cdot \omega = 0\} = \{0\}.$$

Définition Projecteur de « moyenne »

$$\langle a \rangle = \hat{a}_{0,0} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T a_\tau d\tau$$

Comportement de la solution

$$u^\varepsilon(t) = \exp\left(-t + \frac{\varepsilon}{2\pi} \sin(2\pi t/\varepsilon) + \varepsilon \sin(t/\varepsilon)\right)$$



Ansatz de décomposition

$$\partial_t u^\varepsilon(t) = a_{t/\varepsilon} u^\varepsilon(t)$$

$$u^\varepsilon(t) = \Phi_{t/\varepsilon}^\varepsilon \exp(tA^\varepsilon) (\Phi_0^\varepsilon)^{-1} u_0$$

- $\tau \mapsto \Phi_\tau^\varepsilon$ changement de variable, dynamique exponentielle
- A^ε dynamique moyenne

Équation homologique

$$\partial_\tau \Phi_\tau^\varepsilon = \varepsilon (a_\tau \Phi_\tau^\varepsilon - \Phi_\tau^\varepsilon A^\varepsilon), \quad A^\varepsilon = \langle \Phi^\varepsilon \rangle^{-1} \langle a \Phi^\varepsilon \rangle$$

Itérations Point fixe avec le défaut

$$\partial_\tau \Phi_\tau^{[n+1]} = \varepsilon (a_\tau \Phi_\tau^{[n]} - \Phi_\tau^{[n]} A^{[n]}), \quad A^{[n]} = \langle \Phi^{[n]} \rangle^{-1} \langle a \Phi^{[n]} \rangle,$$

$$\delta_\tau^{[n]} = \frac{1}{\varepsilon} \partial_\tau \Phi_\tau^{[n]} + \Phi_\tau^{[n]} A^{[n]} - a_\tau \Phi_\tau^{[n]}.$$

Condition de fermeture $\langle \Phi^{[n]} \rangle = \text{id}$.

Ansatz de décomposition

$$\partial_t u^\varepsilon(t) = a_{t/\varepsilon} u^\varepsilon(t)$$

$$u^\varepsilon(t) = \Phi_{t/\varepsilon}^\varepsilon \exp(tA^\varepsilon) (\Phi_0^\varepsilon)^{-1} u_0$$

- $\tau \mapsto \Phi_\tau^\varepsilon$ changement de variable, dynamique exponentielle
- A^ε dynamique moyenne

Équation homologique

$$\partial_\tau \Phi_\tau^\varepsilon = \varepsilon (a_\tau \Phi_\tau^\varepsilon - \Phi_\tau^\varepsilon A^\varepsilon), \quad A^\varepsilon = \langle \Phi^\varepsilon \rangle^{-1} \langle a \Phi^\varepsilon \rangle$$

Itérations Point fixe avec le défaut

$$\partial_\tau \Phi_\tau^{[n+1]} = \varepsilon (a_\tau \Phi_\tau^{[n]} - \Phi_\tau^{[n]} A^{[n]}), \quad A^{[n]} = \langle \Phi^{[n]} \rangle^{-1} \langle a \Phi^{[n]} \rangle,$$

$$\delta_\tau^{[n]} = \frac{1}{\varepsilon} \partial_\tau \Phi_\tau^{[n]} + \Phi_\tau^{[n]} A^{[n]} - a_\tau \Phi_\tau^{[n]}.$$

Condition de fermeture $\langle \Phi^{[n]} \rangle = \text{id}$.

Ansatz de décomposition

$$\partial_t u^\varepsilon(t) = a_{t/\varepsilon} u^\varepsilon(t)$$

$$u^\varepsilon(t) = \Phi_{t/\varepsilon}^\varepsilon \exp(tA^\varepsilon) (\Phi_0^\varepsilon)^{-1} u_0$$

- $\tau \mapsto \Phi_\tau^\varepsilon$ changement de variable, dynamique exponentielle
- A^ε dynamique moyenne

Équation homologique

$$\partial_\tau \Phi_\tau^\varepsilon = \varepsilon (a_\tau \Phi_\tau^\varepsilon - \Phi_\tau^\varepsilon A^\varepsilon), \quad A^\varepsilon = \langle \Phi^\varepsilon \rangle^{-1} \langle a \Phi^\varepsilon \rangle$$

Itérations Point fixe avec le défaut

$$\partial_\tau \Phi_\tau^{[n+1]} = \varepsilon (a_\tau \Phi_\tau^{[n]} - \Phi_\tau^{[n]} A^{[n]}), \quad A^{[n]} = \langle \Phi^{[n]} \rangle^{-1} \langle a \Phi^{[n]} \rangle,$$

$$\delta_\tau^{[n]} = \frac{1}{\varepsilon} \partial_\tau \Phi_\tau^{[n]} + \Phi_\tau^{[n]} A^{[n]} - a_\tau \Phi_\tau^{[n]}.$$

Condition de fermeture $\langle \Phi^{[n]} \rangle = \text{id}$.

Caractère bien posé de la décomposition

$$\partial_\tau \Phi_\tau^{[n+1]} = \varepsilon (a_\tau \Phi_\tau^{[n]} - \Phi_\tau^{[n]} A^{[n]}), \quad A^{[n]} = \langle \Phi^{[n]} \rangle^{-1} \langle a \Phi^{[n]} \rangle,$$

$$\delta_\tau^{[n]} = \frac{1}{\varepsilon} \partial_\tau \Phi_\tau^{[n]} + \Phi_\tau^{[n]} A^{[n]} - a_\tau \Phi_\tau^{[n]}.$$

Condition de fermeture $\langle \Phi^{[n]} \rangle = \text{id}$.

Proposition (Bidégaray-Fesquet, Jourdana, LT)

Pour tout $n \in \mathbb{N}$ il existe ε_n t.q. la décomposition d'ordre n est bien définie pour $\varepsilon \leq \varepsilon_n$, et elle vérifie

$$\|\Phi^{[n]} - \text{id}\|_0 = \mathcal{O}(\varepsilon), \quad \|A^{[n]}\|_0 = \mathcal{O}(1).$$

En outre le défaut est de taille $\mathcal{O}(\varepsilon^n)$ grâce à la relation

$$\|\delta^{[n]}\|_\nu \leq \|a\|_{(n+1)\nu} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_n} \right)^n.$$

Problème micro-macro

$$u^\varepsilon(t) = \Phi_{t/\varepsilon}^{[n]} v^{[n]}(t) + w^{[n]}(t)$$

avec $v^{[n]}(t) = \exp(tA^{[n]}) (\Phi_0^{[n]})^{-1} u_0$ et $w^{[n]} = \mathcal{O}(\varepsilon^{n+1})$.

$$\begin{cases} \partial_t v^{[n]}(t) = A^{[n]} v^{[n]}(t), & v^{[n]}(0) = (\Phi_0^{[n]})^{-1} u_0, \\ \partial_t w^{[n]}(t) = a_{t/\varepsilon} w^{[n]}(t) - \delta_{t/\varepsilon}^{[n]} v^{[n]}(t), & w^{[n]}(0) = 0. \end{cases}$$

Proposition – Précision uniforme

Le problème micro-macro est bien posé à l'ordre $n + 1$, au sens

$$\forall 1 \leq k \leq n + 1, \quad \partial_t^k v^{[n]}, \partial_t^k w^{[n]} = \mathcal{O}(1)$$

On calcule $(v_\ell^{[n]})$ et $(w_\ell^{[n]})$ avec un schéma d'ordre n standard et alors

$$\sup_{\varepsilon \in (0, \varepsilon_n]} \max_{0 \leq \ell \leq N} \left| u^\varepsilon(t_\ell) - \Phi_{t_\ell/\varepsilon}^{[n]} v_\ell^{[n]} - w_\ell^{[n]} \right| \leq C \Delta t^n$$

avec C indépendant de ε .

Problème micro-macro

$$u^\varepsilon(t) = \Phi_{t/\varepsilon}^{[n]} v^{[n]}(t) + w^{[n]}(t)$$

avec $v^{[n]}(t) = \exp(tA^{[n]}) (\Phi_0^{[n]})^{-1} u_0$ et $w^{[n]} = \mathcal{O}(\varepsilon^{n+1})$.

$$\begin{cases} \partial_t v^{[n]}(t) = A^{[n]} v^{[n]}(t), & v^{[n]}(0) = (\Phi^{[n]})^{-1} u_0, \\ \partial_t w^{[n]}(t) = a_{t/\varepsilon} w^{[n]}(t) - \delta_{t/\varepsilon}^{[n]} v^{[n]}(t), & w^{[n]}(0) = 0. \end{cases}$$

Proposition – Précision uniforme

Le problème micro-macro est bien posé à l'ordre $n + 1$, au sens

$$\forall 1 \leq k \leq n + 1, \quad \partial_t^k v^{[n]}, \partial_t^k w^{[n]} = \mathcal{O}(1)$$

On calcule $(v_\ell^{[n]})$ et $(w_\ell^{[n]})$ avec un schéma d'ordre n standard et alors

$$\sup_{\varepsilon \in (0, \varepsilon_n]} \max_{0 \leq \ell \leq N} \left| u^\varepsilon(t_\ell) - \Phi_{t_\ell/\varepsilon}^{[n]} v_\ell^{[n]} - w_\ell^{[n]} \right| \leq C \Delta t^n$$

avec C indépendant de ε .

Problème micro-macro

$$u^\varepsilon(t) = \Phi_{t/\varepsilon}^{[n]} v^{[n]}(t) + w^{[n]}(t)$$

avec $v^{[n]}(t) = \exp(tA^{[n]}) (\Phi_0^{[n]})^{-1} u_0$ et $w^{[n]} = \mathcal{O}(\varepsilon^{n+1})$.

$$\begin{cases} \partial_t v^{[n]}(t) = A^{[n]} v^{[n]}(t), & v^{[n]}(0) = (\Phi_0^{[n]})^{-1} u_0, \\ \partial_t w^{[n]}(t) = a_{t/\varepsilon} w^{[n]}(t) - \delta_{t/\varepsilon}^{[n]} v^{[n]}(t), & w^{[n]}(0) = 0. \end{cases}$$

Proposition – Précision uniforme

Le problème micro-macro est bien posé à l'ordre $n + 1$, au sens

$$\forall 1 \leq k \leq n + 1, \quad \partial_t^k v^{[n]}, \partial_t^k w^{[n]} = \mathcal{O}(1)$$

On calcule $(v_\ell^{[n]})$ et $(w_\ell^{[n]})$ avec un schéma d'ordre n standard et alors

$$\sup_{\varepsilon \in (0, \varepsilon_n]} \max_{0 \leq \ell \leq N} \left| u^\varepsilon(t_\ell) - \Phi_{t_\ell/\varepsilon}^{[n]} v_\ell^{[n]} - w_\ell^{[n]} \right| \leq C \Delta t^n$$

avec C indépendant de ε .

Sommaire

- 1 Présentation du modèle de Bloch
- 2 Développement micro-macro
- 3 Application numérique**

Application d'un schéma standard

$$\partial_t \rho_{nn}^\#(t) = \sum_{k \neq n} \Psi_{kn} \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right) \left(\rho_{kk}^\#(t) - \rho_{nn}^\#(t) \right)$$

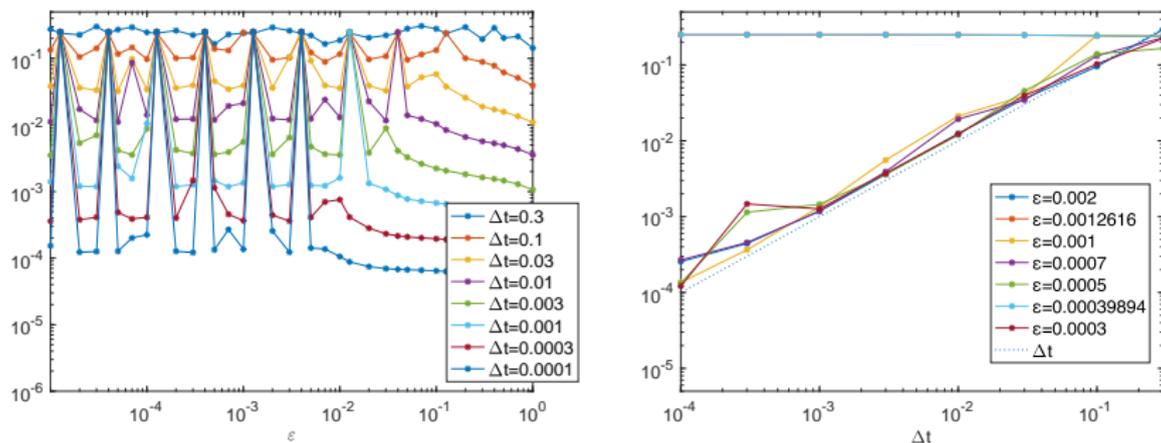


Figure: Erreur L^∞ en fonction de Δt (à gauche) et de ε (à droite) avec Euler explicite sur le système d'origine sur $\rho^\#$.

Comportement asymptotique

Naturellement, on retrouve l'équation de taux

$$\partial_t v_n^{[0]} = \sum_{k \neq n} \langle \Psi_{kn} \rangle (v_k^{[0]} - v_n^{[0]}), \quad \rho_{nn}^\# = v_n^{[0]} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

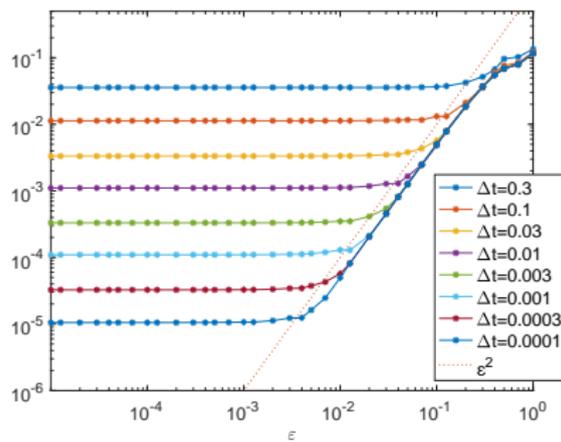
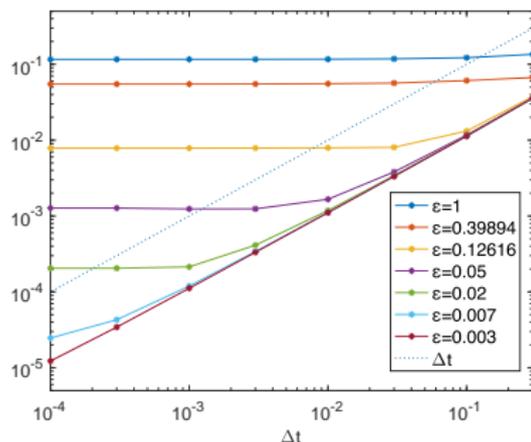


Figure: Erreur L^∞ entre $\rho^\#$ exact et $v^{[0]}$ en fonction de Δt (à gauche) et de ε (à droite) avec Euler explicite sur le système d'origine sur $\rho^\#$.

Micro-macro d'ordre 1

$$\rho^\sharp(t) = \Phi_{t/\varepsilon}^{[1]} v^{[1]}(t) + w^{[1]}(t)$$

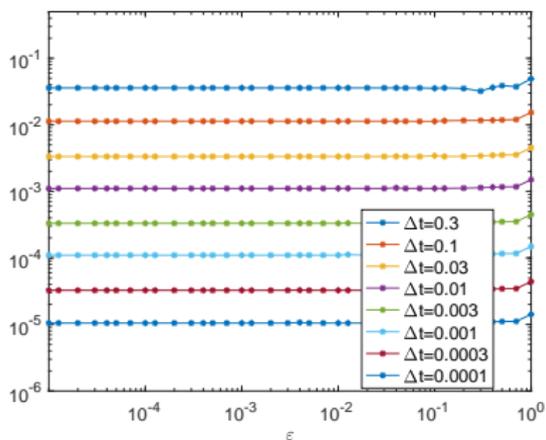
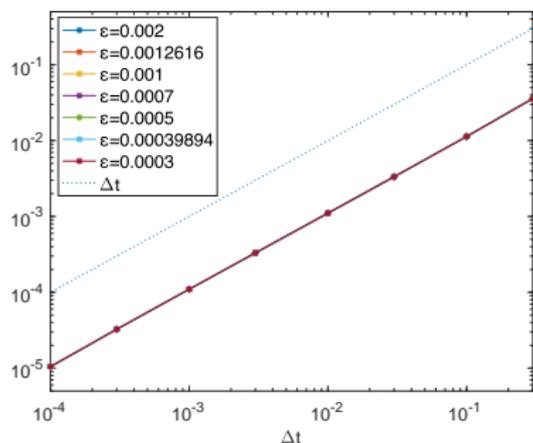


Figure: Erreur L^∞ sur ρ^\sharp en fonction de Δt (à gauche) et de ε (à droite) avec Euler explicite sur le système micro-macro d'ordre 1.

Conclusion

Résumé

- Présentation d'un modèle asymptotique
- Notions de convergence avec prise en compte du paramètre ε
- **Développement micro-macro** : Extension de résultats connus à un cadre plus général
- **Résultats numériques** : Amélioration de la convergence

Perspectives

- Traitement du modèle de Bloch (forcé) complet
- Calcul numérique du développement micro-macro
- Étude d'autres problèmes de cette classe



Conclusion

Résumé

- Présentation d'un modèle asymptotique
- Notions de convergence avec prise en compte du paramètre ε
- **Développement micro-macro** : Extension de résultats connus à un cadre plus général
- **Résultats numériques** : Amélioration de la convergence

Perspectives

- Traitement du modèle de Bloch (forcé) complet
- Calcul numérique du développement micro-macro
- Étude d'autres problèmes de cette classe



Conclusion

Résumé

- Présentation d'un modèle asymptotique
- Notions de convergence avec prise en compte du paramètre ε
- **Développement micro-macro** : Extension de résultats connus à un cadre plus général
- **Résultats numériques** : Amélioration de la convergence

Perspectives

- Traitement du modèle de Bloch (forcé) complet
- Calcul numérique du développement micro-macro
- Étude d'autres problèmes de cette classe



APPENDICES

Inégalité diophantienne et norme

Inégalité diophantienne On pose $C_D > 0$ et $\nu > 0$ t.q.

$$\forall \alpha \in \mathbb{Z}^r \setminus \{0_r\}, \quad |\alpha \cdot \omega| \geq \frac{C_D}{|\alpha|^\nu}$$

Définition – Norme d'algèbre sur les séries exponentielles

Si $\varphi_\tau = \sum_{\alpha, m} \widehat{\varphi}_{\alpha, m} e^{(i\alpha \cdot \omega - m)\tau}$, on définit

$$\forall \mu \geq 0, \quad \|\varphi\|_\mu = \sum_{\alpha, m} (1 + 3|\alpha|^2)^{\mu/2} |\widehat{\varphi}_{\alpha, m}|.$$

Cette norme est algébrique, $\|\varphi \psi\|_\mu \leq \|\varphi\|_\mu \|\psi\|_\mu$.

Schéma intégral pour un modèle de Bloch

Le modèle de Bloch que nous étudions prend la forme

$$\frac{d}{dt} \rho_{nn}(t) = \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} \sum_k (p_{nk} \rho_{kn}(t) - p_{kn} \rho_{nk}(t))$$

$$\frac{d}{dt} \rho_{nm}(t) = \frac{\Omega_{nm}}{\varepsilon^2} \rho_{nm}(t) + \frac{i}{\varepsilon} \phi_{t/\varepsilon^2} \sum_k (p_{nk} \rho_{km}(t) - p_{km} \rho_{nk}(t))$$

avec $\theta \mapsto \phi_\theta \in \mathbb{R}$ périodique de moyenne nulle. Pour capturer le comportement asymptotique $\varepsilon \rightarrow 0$, nous exploitons la forme intégrale sur $\rho_{nm}(t)$ qu'on injecte dans l'équation sur ρ_{nn} .

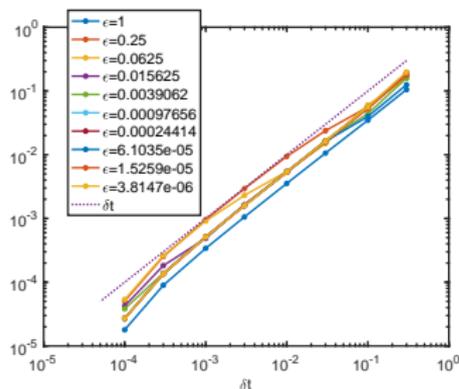
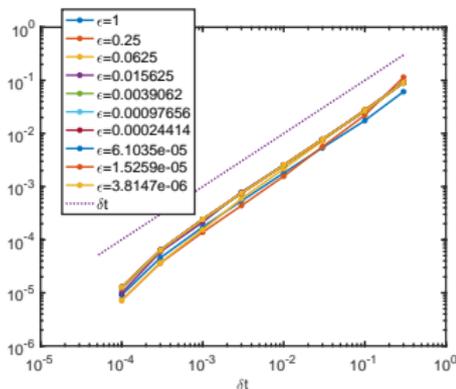


Figure: Erreur sur le modèle de Bloch en fonction de δt pour différentes valeurs de ε , avec les populations ρ_{nn} (gauche) et les cohérences renormalisées $\frac{1}{\varepsilon} \rho_{nm}$ (droite).