

Physique Numérique – Semaine 14

Rappel de la semaine 13

☐ 4.3 Schrödinger.

- ☐ Crank-Nicolson: conservation exacte de l'énergie moyenne.
- ☐ Particule dans un potentiel $V(x)$, effet tunnel, résonance
- ☐ Détecteur de particule
- ☐ Particule dans un potentiel $V(x)$: Oscillateur harmonique, états quasi-classiques (cohérents)

Plan de la semaine 14

☐ 4.3 Schrödinger

- ☐ Heisenberg et Fourier
- ☐ Etats stationnaires (ou «propres»), énergies «propres».
- ☐ Particule dans un potentiel $V(x)$ périodique. Gaps.
- ☐ **Physique numérique des plasmas de fusion** (en bref)
- ☐ **Exercice 6: à rendre AUJOURD'HUI.**

Physique Numérique – Semaine 14

Evaluation approfondie des cours: jusqu'au 8 juin
5 minutes à la fin du cours

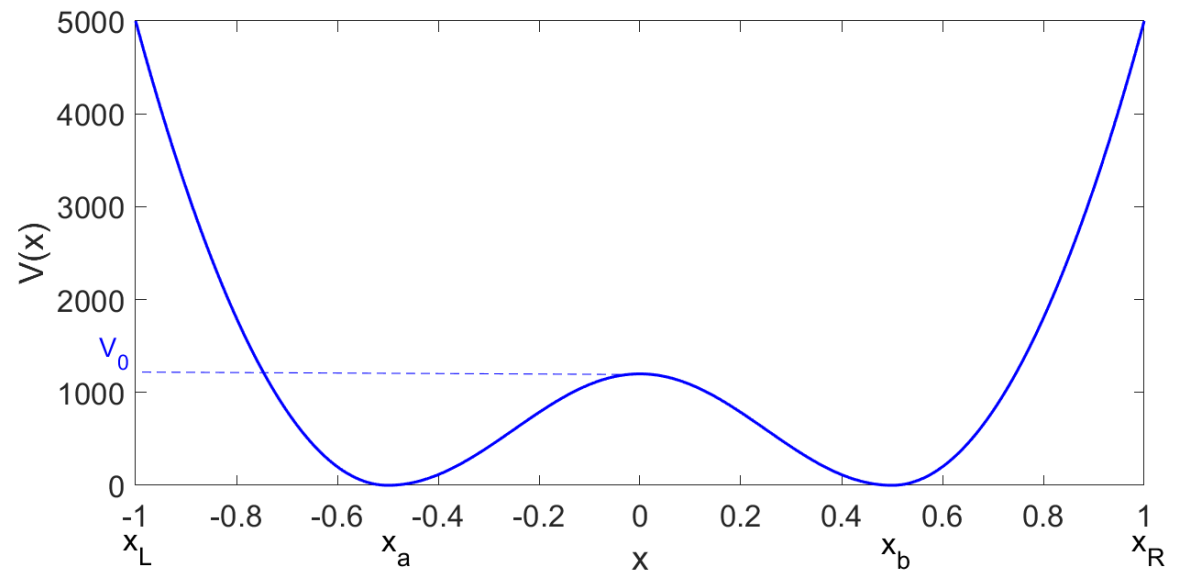
- Aller sur la page d'accueil de Moodle (PAS sur celle du cours)
- Aller à la case «Evaluation approfondie»
- Sélectionner le cours PHYS-210_SP24 et compléter le feedback

Documentation

- Lecture pour la Semaine #14: Notes de cours
 - **Section 4.3.4 Oscillateur harmonique**
 - **Section 4.3.5 Etats stationnaires (propres)**

<http://moodle.epfl.ch/mod/resource/view.php?id=8220>

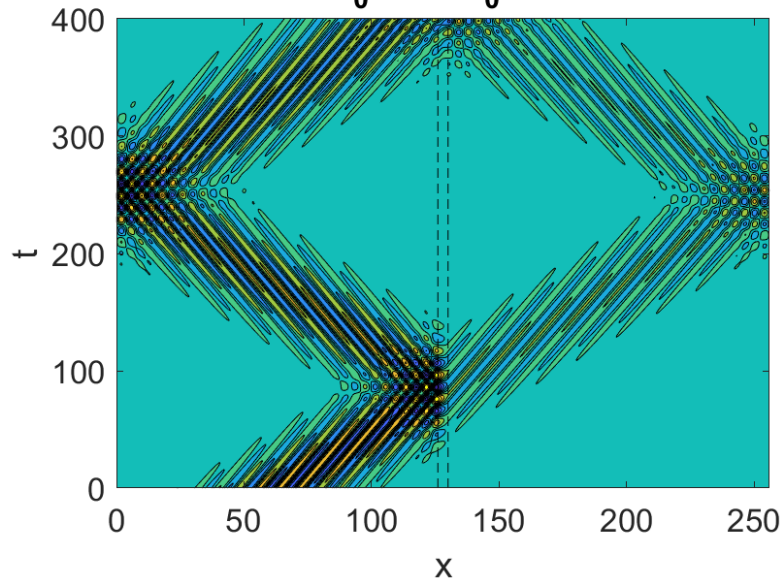
Exercice 6



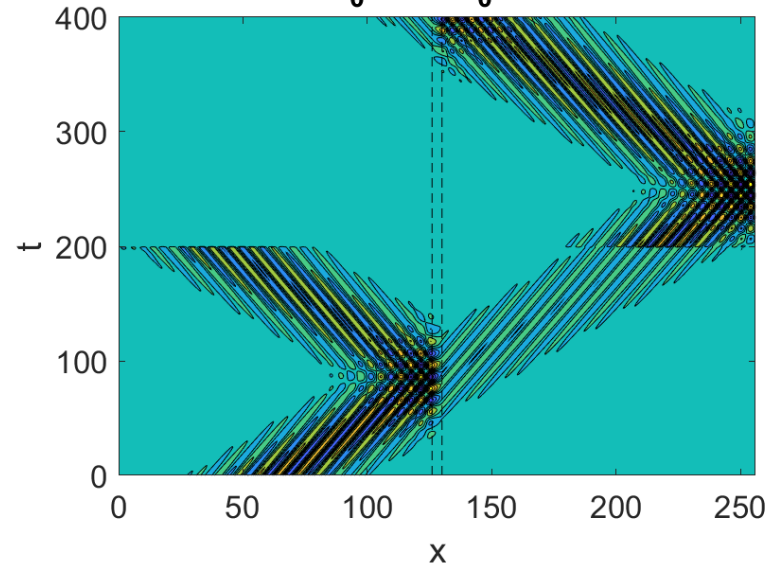
- 2 sessions: 14, 21 mai
- Délai de rendu
~~mardi 27 mai~~ → mercredi 28 mai 2025
- 3e session, 28 mai : “rattrapage”

Détection ou non ...

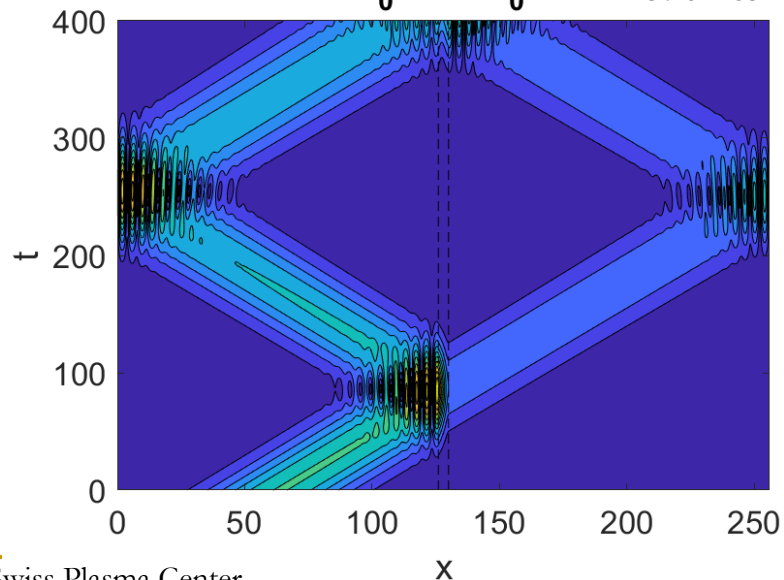
Barrier $\delta=4.3$ $V_0=1.02E_0$ $n=32$ $\text{Re}(\psi(x,t))$



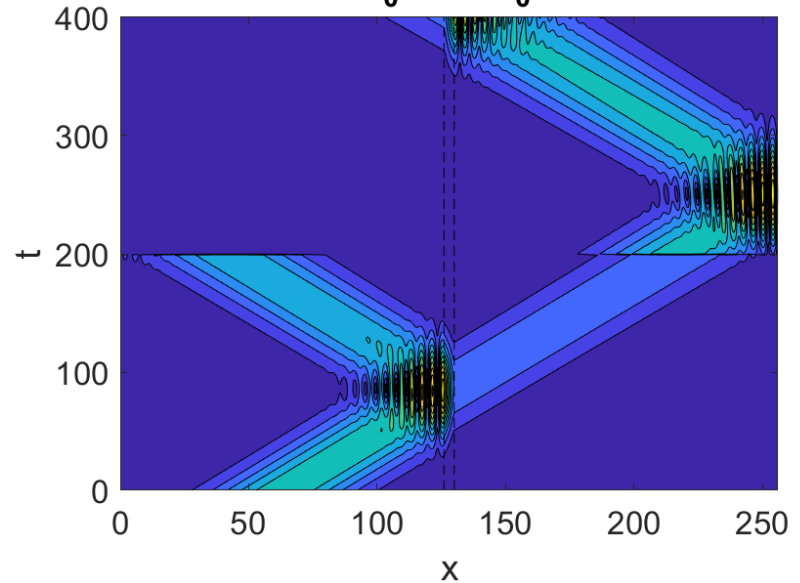
Barrier $\delta=4.3$ $V_0=1.02E_0$ $n=32$ $\text{Re}(\psi(x,t))$



Barrier $\delta=4.3$ $V_0=1.02E_0$ $n=32$ $|\psi(x,t)|$

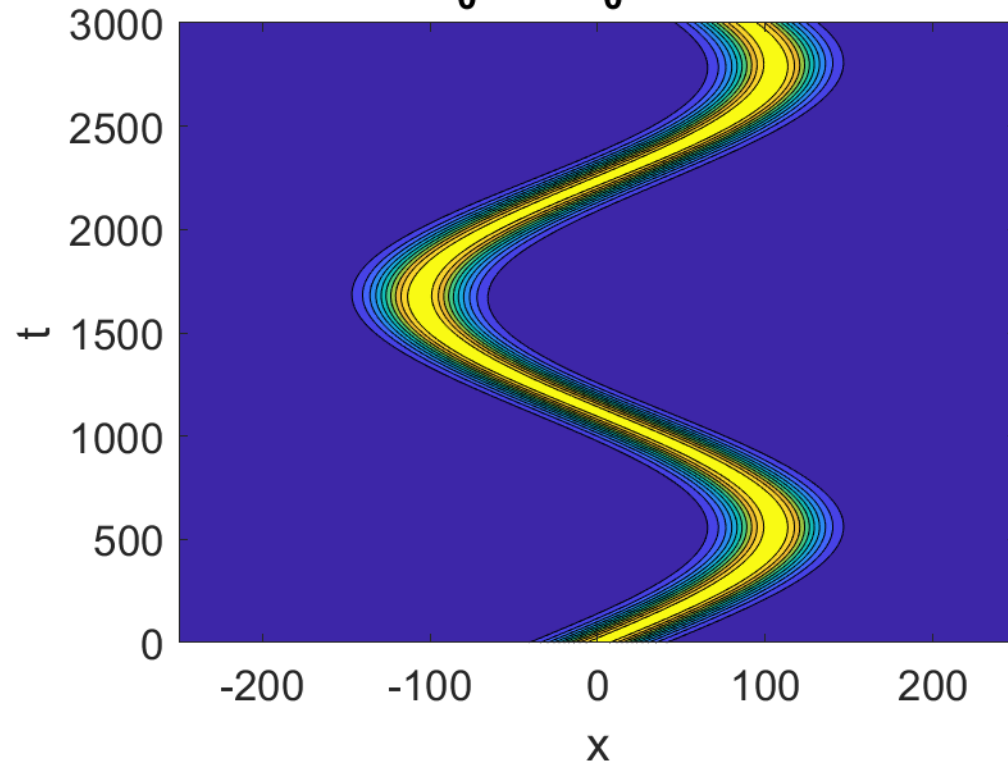


Barrier $\delta=4.3$ $V_0=1.02E_0$ $n=32$ $|\psi(x,t)|$

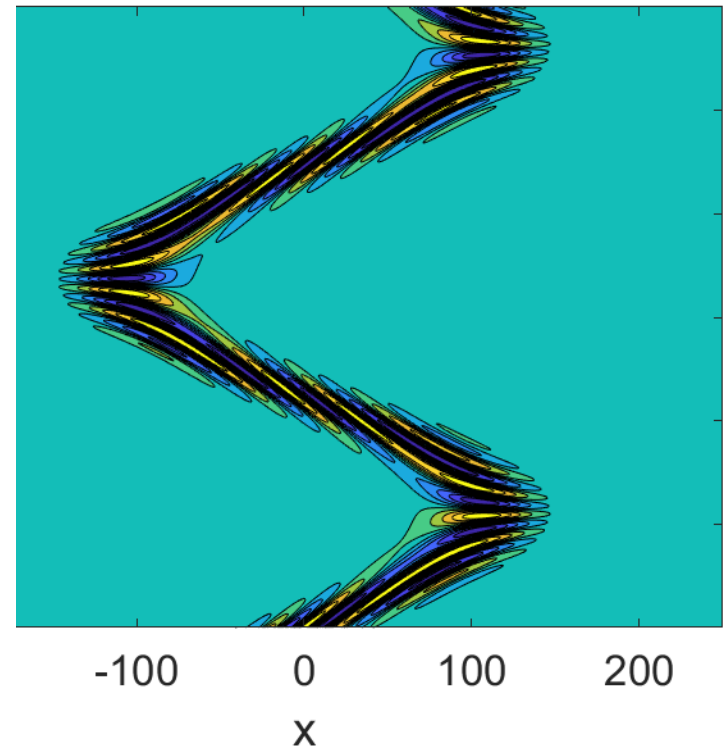


Etats cohérents ou semi - classiques

Harmo $V_0 = 5.5E_0$ $n=24$ $|\psi(x,t)|$



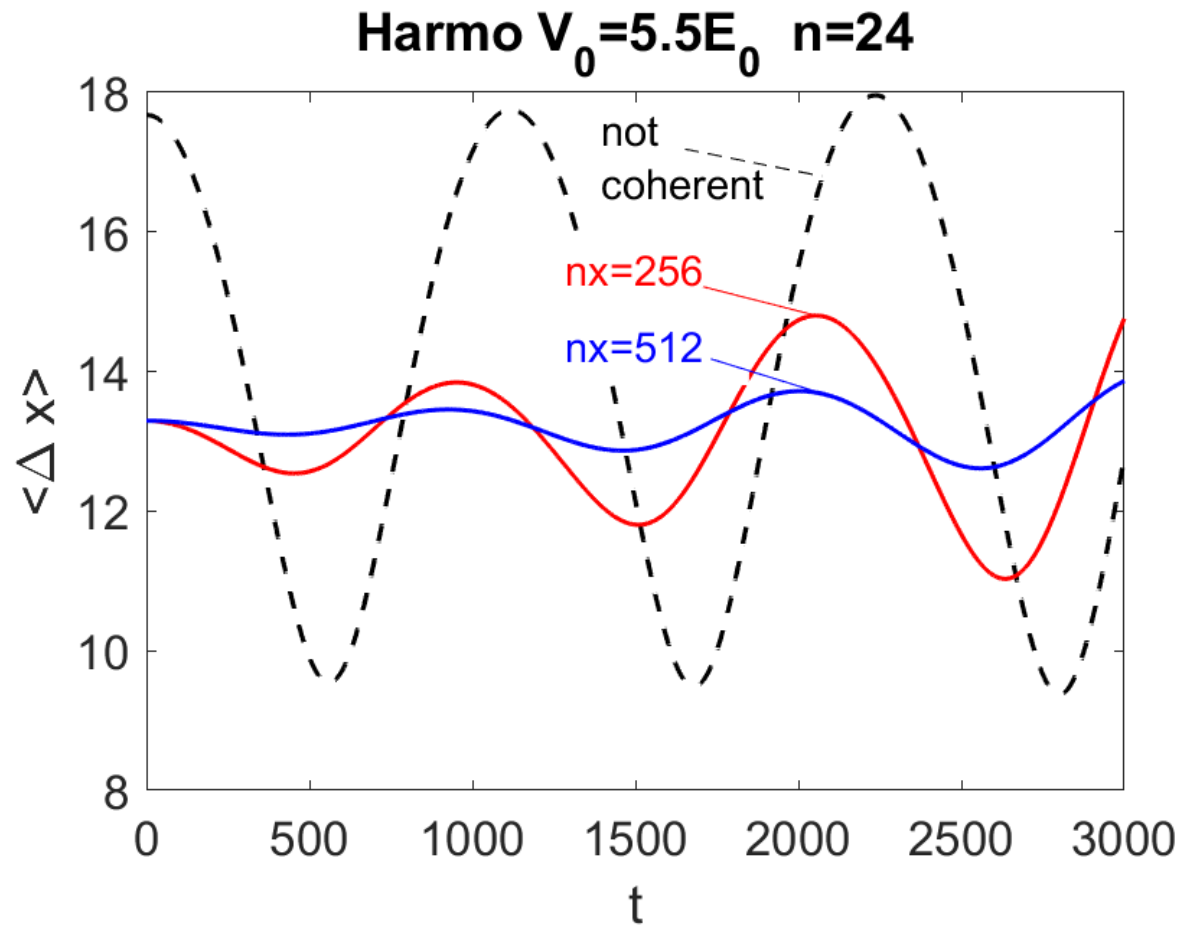
mo $V_0 = 5.5E_0$ $n=24$ $\text{Re}(\psi(x,t))$



Etats dits «quasi-classiques», tels que leur incertitude Δx est constante au cours du temps. Il s'agit de paquets d'ondes gaussiens avec

$$\Delta x = \sqrt{\hbar / 2 m \omega_0}$$

Etats cohérents ou semi - classiques



■ Principe d'incertitude de Heisenberg

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \hbar / 2$$

■ Peut se comprendre à l'aide de la transformée de Fourier

- Des démonstrations seront présentées au cours
- Preuve mathématique formelle:

<https://brilliant.org/wiki/heisenberg-uncertainty-principle/>

■ Principe d'incertitude de Heisenberg et transformées de Fourier

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}(k, t) e^{ikx} dk \quad \hat{\psi}(k, t) \text{ est la T.F. en } x \text{ de } \psi(x, t)$$

N.B. : On peut ensuite faire la T.F en t de $\hat{\psi}(k, t)$. Cependant, dans la suite, nous omettrons la dépendance en t .

■ Theorem (Fourier-Heisenberg): $(\Delta x)(\Delta k) \geq 1/2$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} ik \hat{\psi} e^{ikx} dk \quad ik \hat{\psi} \text{ est la T.F. en } x \text{ de } \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

On définit l'opérateur $k = -i \frac{\partial}{\partial x}$ et $(\Delta k)^2(t) = \langle k^2 \rangle(t) - \langle k \rangle^2(t)$

■ Quantique On a $p = \hbar k$, donc : $(\Delta x)(\Delta p) \geq \hbar / 2$

Limite classique

■ Thm Ehrenfest:

$$\frac{d \langle p \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{dV}{dx} \right\rangle$$

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \left\langle \frac{p}{m} \right\rangle .$$

■ ! En général $\left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle \neq \frac{dV(\langle x \rangle)}{dx}$

- Particule classique #1 d'énergie

$$E_{class,1} = \langle H \rangle = \langle p^2 / 2m + V(x) \rangle$$

- Particule classique #2 de quantité de mvmt

$$p_{class,2} = \langle p \rangle$$

$$E_{class,1} \neq E_{class,2} \quad p_{class,1} \neq p_{class,2}$$

Schrödinger stationnaire

■ 4.3.5 Etats d'énergie bien déterminée:

$$\boxed{\psi(\vec{x}, t) = \Psi(\vec{x}) \exp(-i\omega t)} \quad \omega = E / \hbar$$

■ Eq. de Schrödinger stationnaire

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi} \quad \boxed{H(\psi) = E\psi}$$

Les énergies possibles de la particule sont les valeurs propres de l'Hamiltonien.
Les fonctions propres correspondantes sont appelées états propres.

■ Discrétisation $x_j, j = 1..N \quad \Psi_j = \Psi(x_j)$

$$\boxed{\sum_j H_{ij} \Psi_j = E \Psi_i}$$

Les énergies possibles de la particule sont approximées par les valeurs propres de la matrice H résultant de la discrétisation de l'Hamiltonien.
Les états propres sont approximés par les vecteurs propres de H. $\rightarrow \{\Psi_{(n)}, E_n\}$

Principe de superposition

- Solution Générale de Schroedinger = superposition d'états propres:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{x}) \exp(-iE_n t / \hbar)$$

- $|c_n|^2$: probabilité que la particule soit dans l'état no n
- D'où une autre méthode, dite *spectrale*, de résolution de Schroedinger:
 - Opérateur H : calcul des fonctions et valeurs propres $\{\Psi_n(x), E_n\}$
 - \rightarrow Matrice H : calcul des valeurs et vecteurs propres $\{\Psi_n(x_i), E_n\}$
 - Calcul des $c_n = \int \Psi_n^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}, 0) dx \rightarrow c_n = \sum_j \Psi_n^*(x_i) \psi(x_i, 0)$
(projection sur les états propres)
 - La solution numérique est:

$$\psi(x_i, t_j) = \sum_n c_n \Psi_n(x_i) \exp\left(-\frac{iE_n}{\hbar} t_j\right)$$

- Voir aussi <http://falstad.com/qm1d/>

Puits

■ Particule dans un puits de potentiel de profondeur finie

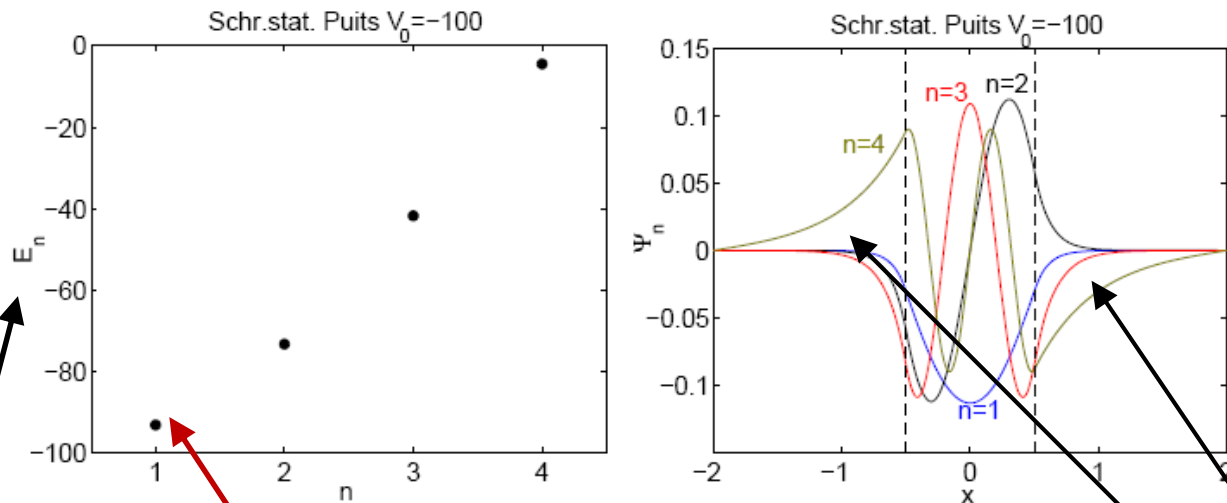


FIG. 4.25 – Spectre des énergies propres (à gauche) et les 4 premiers états propres (à droite) pour une particule confinée dans un puits de potentiel de profondeur finie, $V_0 = -100$, entre $x = -0.5$ et $x = +0.5$ (lignes traitillées).

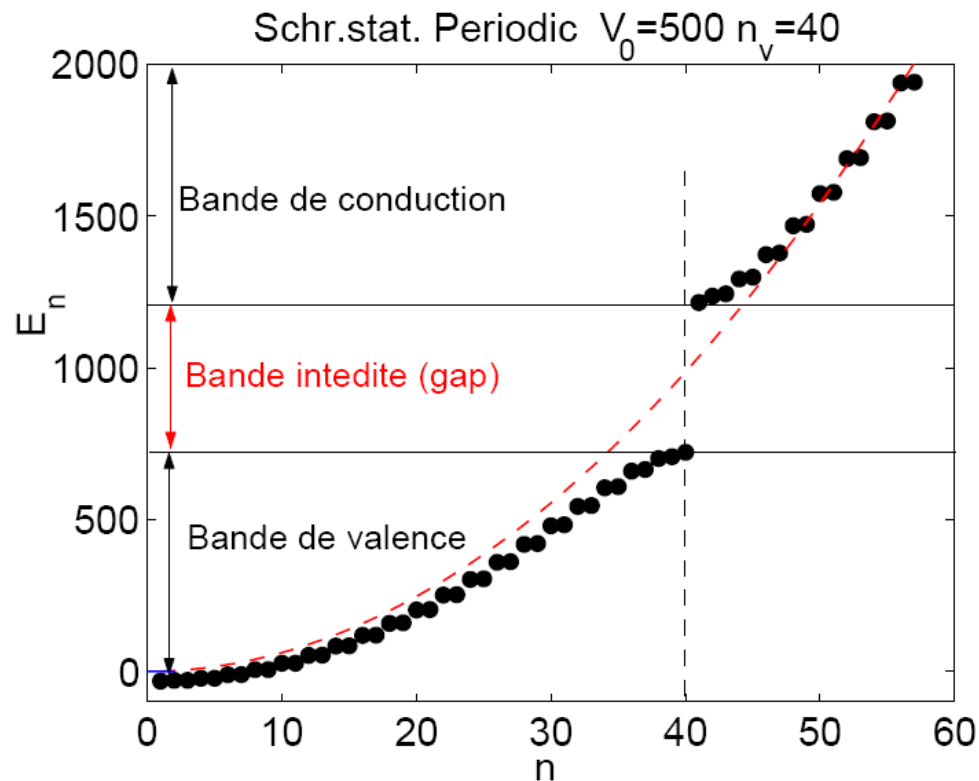
Seul un nombre fini de valeurs négatives de l'énergie est possible: «spectre discret». **Etat fondamental $E > \min(\text{pot})$**

La particule a une probabilité de présence non nulle en dehors du puits

Etats d'énergie positive: «spectre continu»

■ Particule dans un potentiel périodique. Solide

$$V(x) = V_0 \sin\left(n_{\text{pot}} \frac{2\pi x}{L}\right)$$



Retour vers Schroedinger dépendant du temps

- Plaçons un paquet d'onde initial dans un potentiel périodique
- Observons comment ce paquet d'onde se propage dans le système
- Le premier paquet d'onde a une énergie inférieure aux maxima du potentiel
- Le deuxième paquet d'onde a une énergie supérieure aux maxima du potentiel
- ... QUIZ: qui va gagner la course?

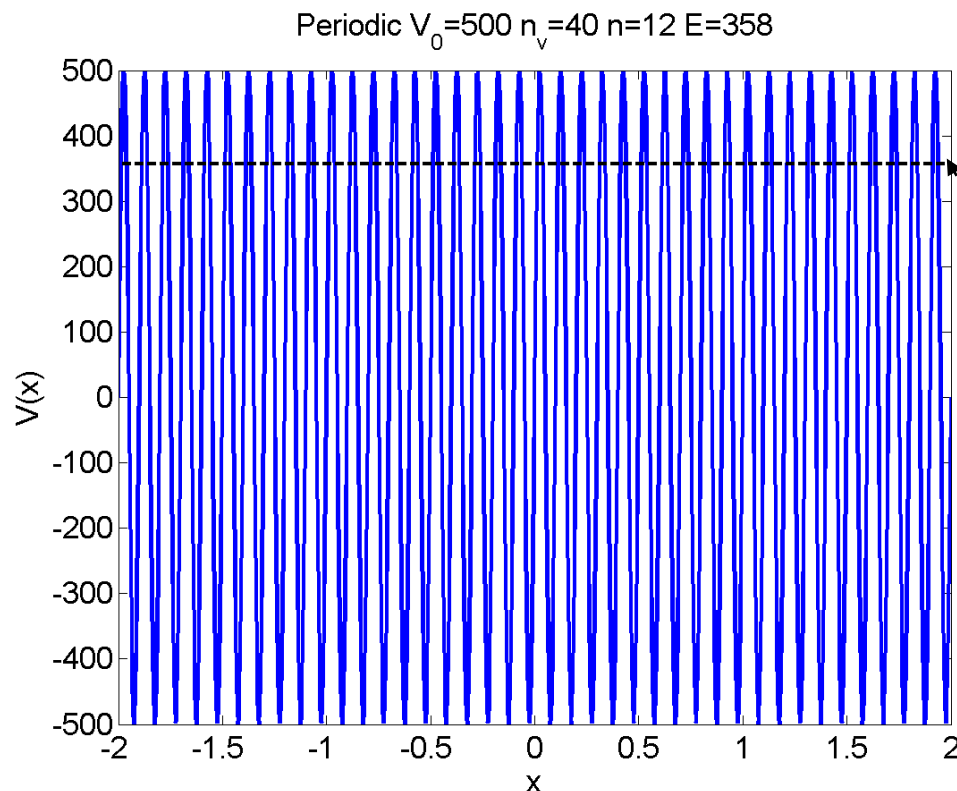
Potentiel périodique

■ Energie inférieure aux maxima de V

$$V(x) = V_0 \sin \left(n_{\text{pot}} \frac{2\pi x}{L} \right)$$

Paquet d'onde initial:

$$\psi(x,0) = C e^{ik_0 x} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}$$



$$k_0 = \frac{2\pi n}{x_r - x_l}$$

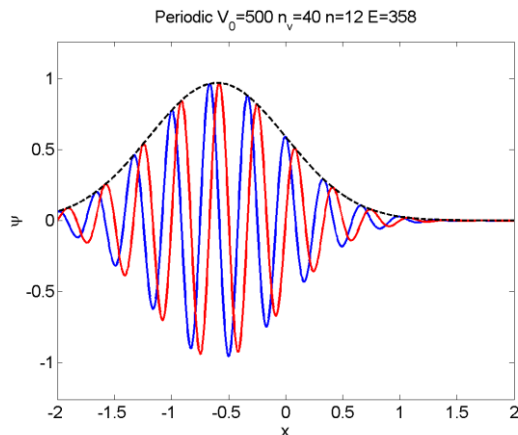
Energie (esp.math.) de la particule

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= (\psi, H(\psi)) \\ &\approx \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \end{aligned}$$

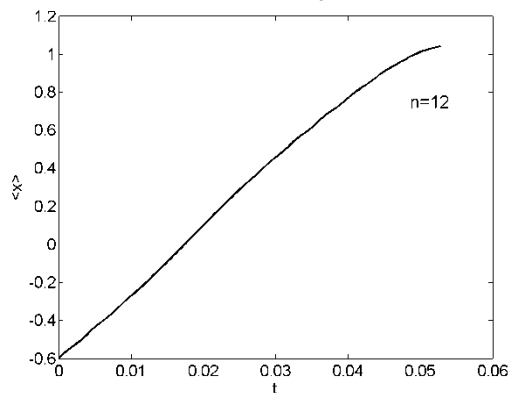
Potentiel périodique

- La particule arrive quand même à avancer!

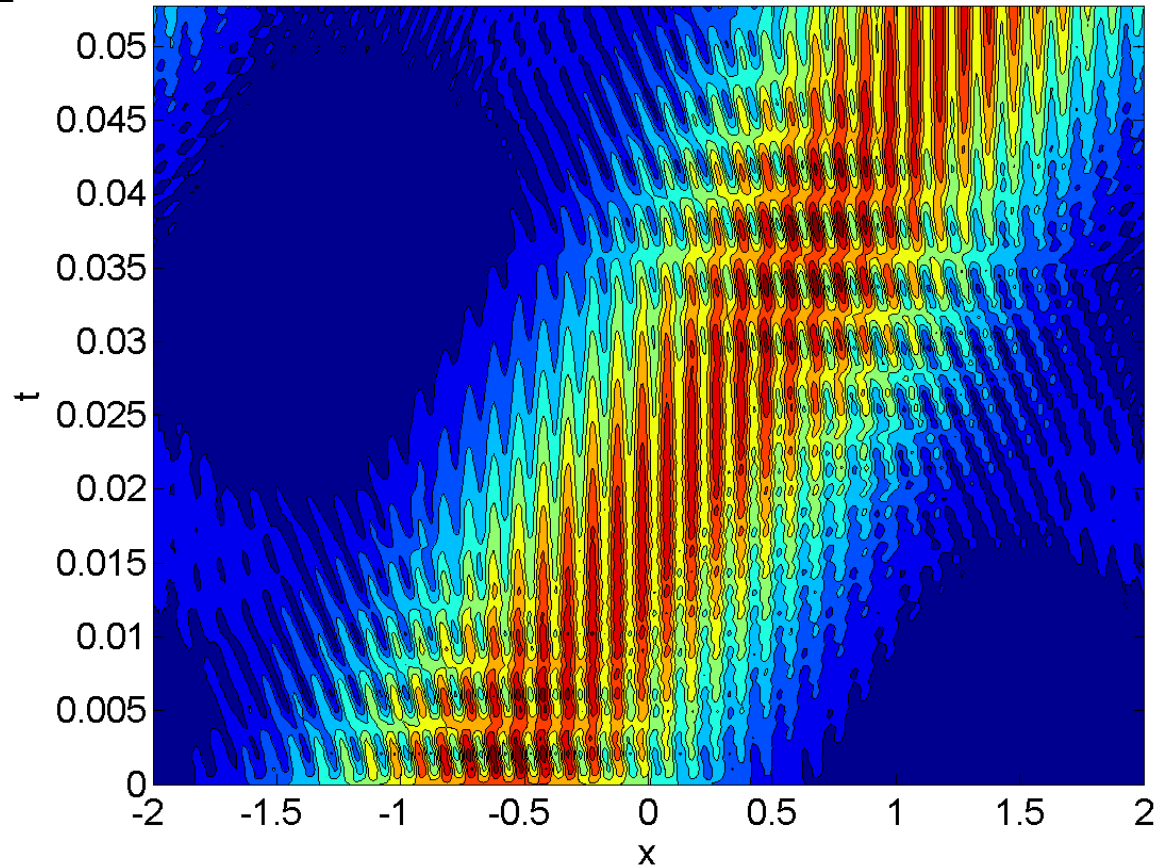
Paquet d'onde initial $n=12$



Position moyenne

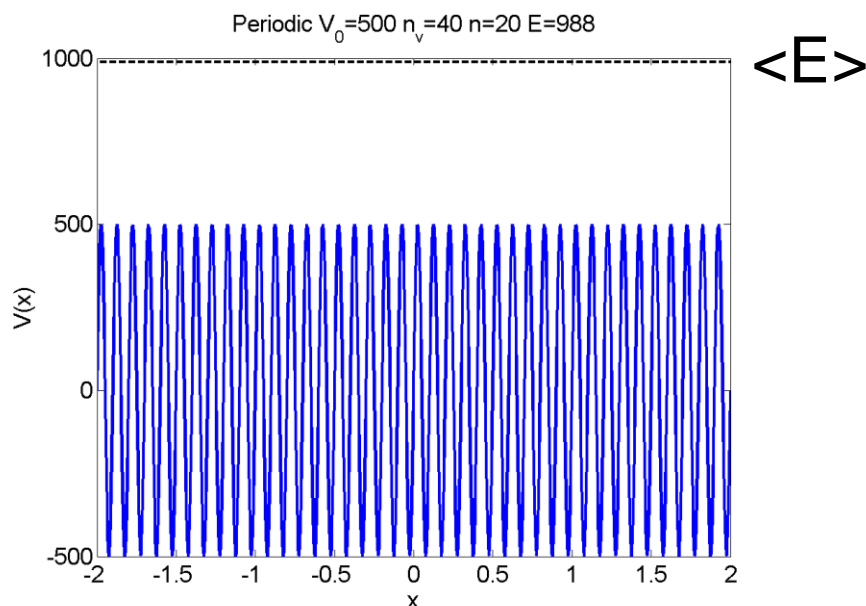


Periodic $V_0=500$ $n_v=40$ $n=12$ $E=358$

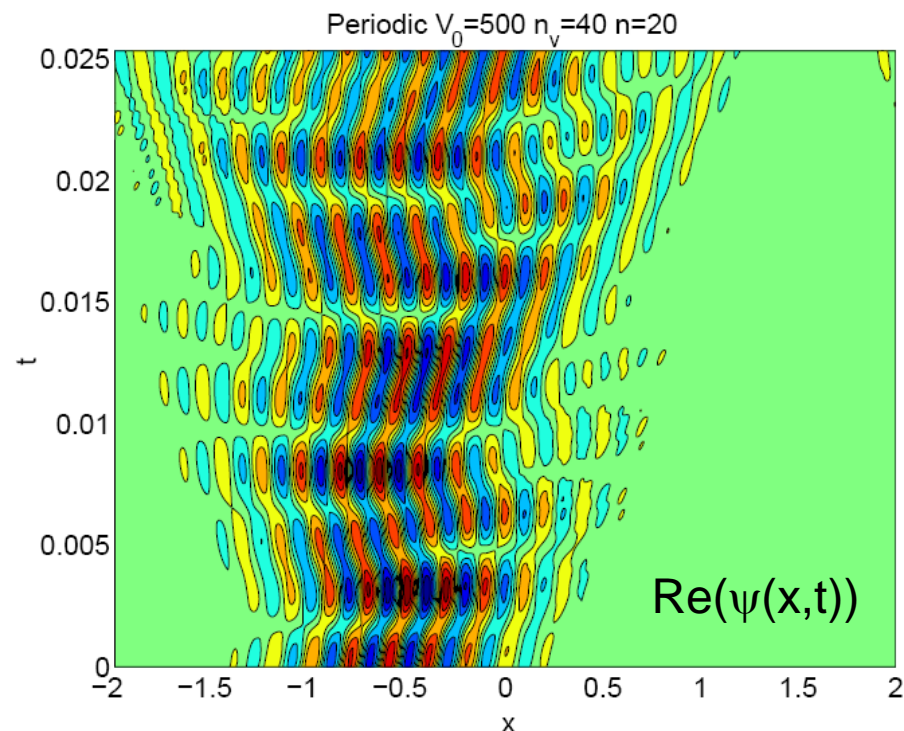


Physique Numérique I-II semaine 28

- Energie supérieure aux maxima de V , ... et pourtant la particule n'arrive pas à avancer!



L'énergie de la particule est bien supérieure au maximum du potentiel.



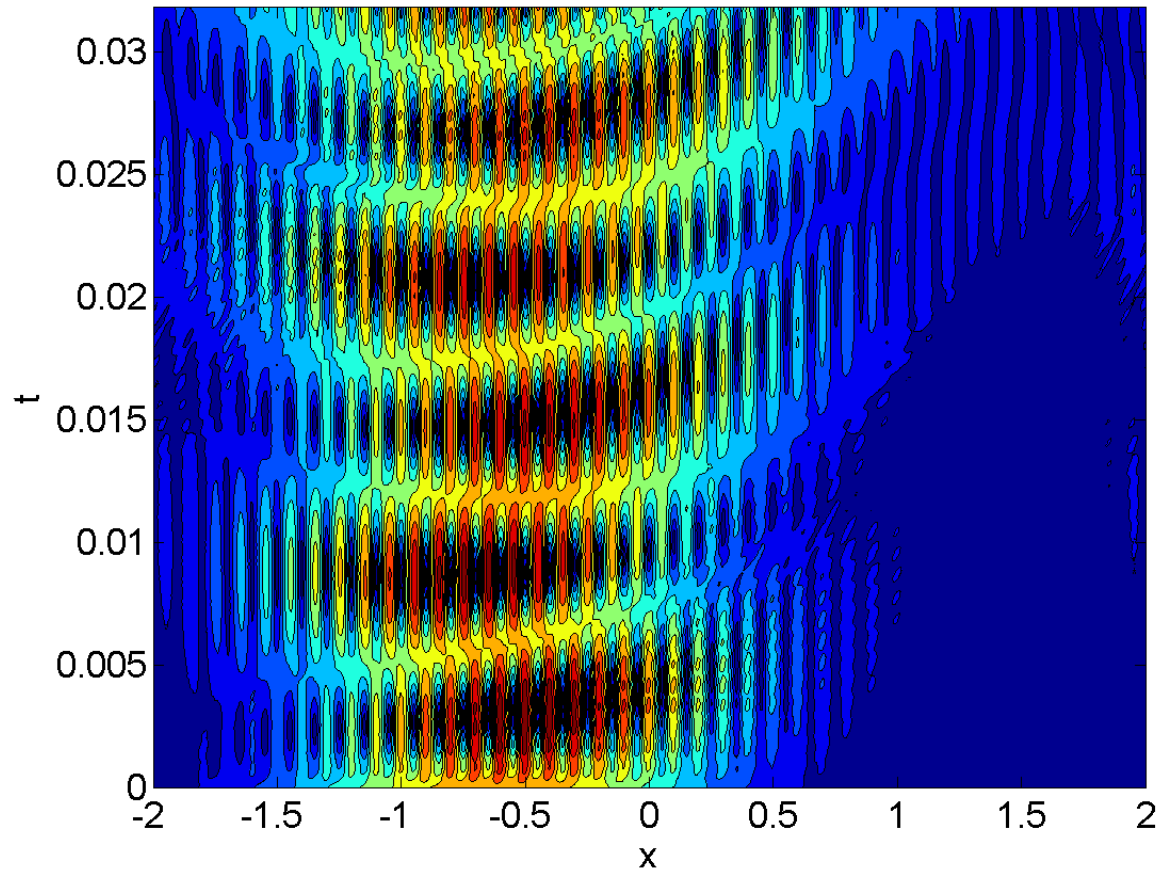
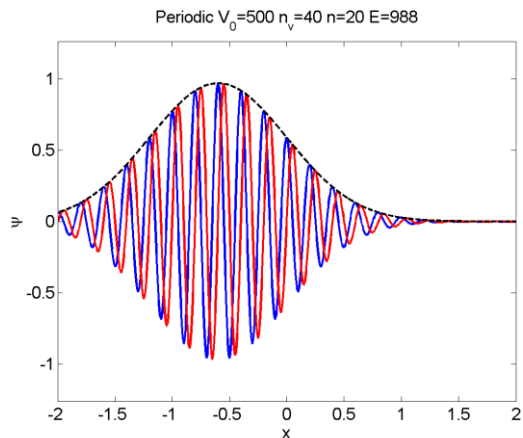
Pourquoi la particule n'arrive-t-elle pas à avancer ?

Physique Numérique I-II semaine 28

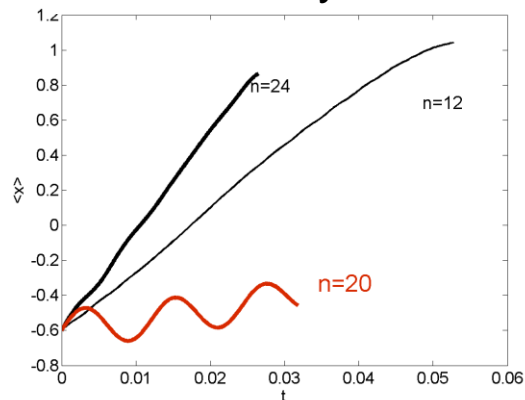
- Longueur d'onde = 2 x périodicité du potentiel

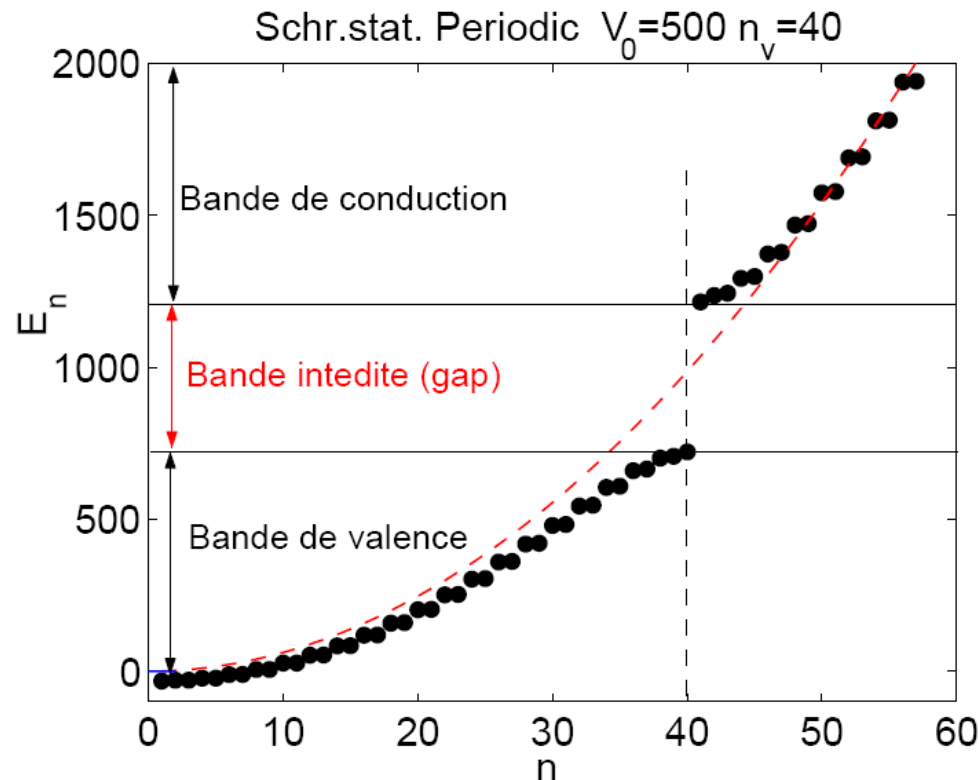
Paquet d'onde initial $n=20$

Periodic $V_0=500$ $n_v=40$ $n=20$ $E=988$



Position moyenne

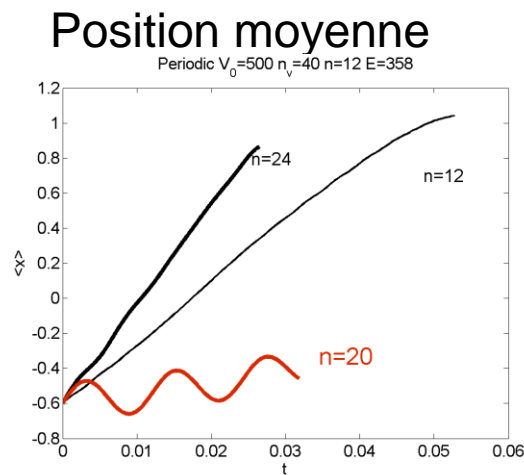
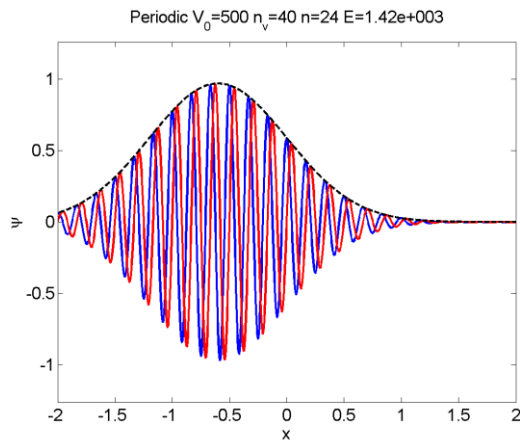




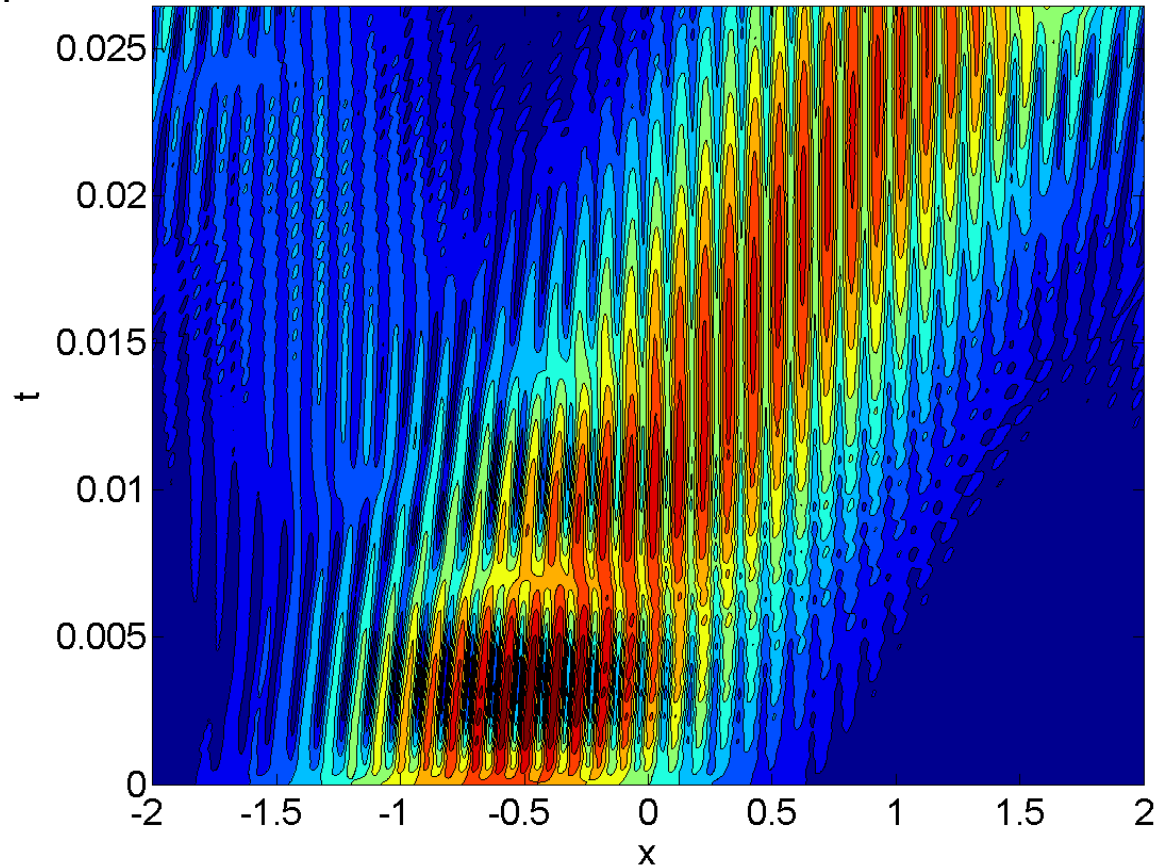
- On est autour du mode $n=40 \rightarrow$ gap
- La vitesse de groupe est nulle au voisinage du gap \rightarrow le paquet d'onde a une vitesse nulle

■ Energie encore plus élevée, au dessus du gap

Paquet d'onde initial $n=24$



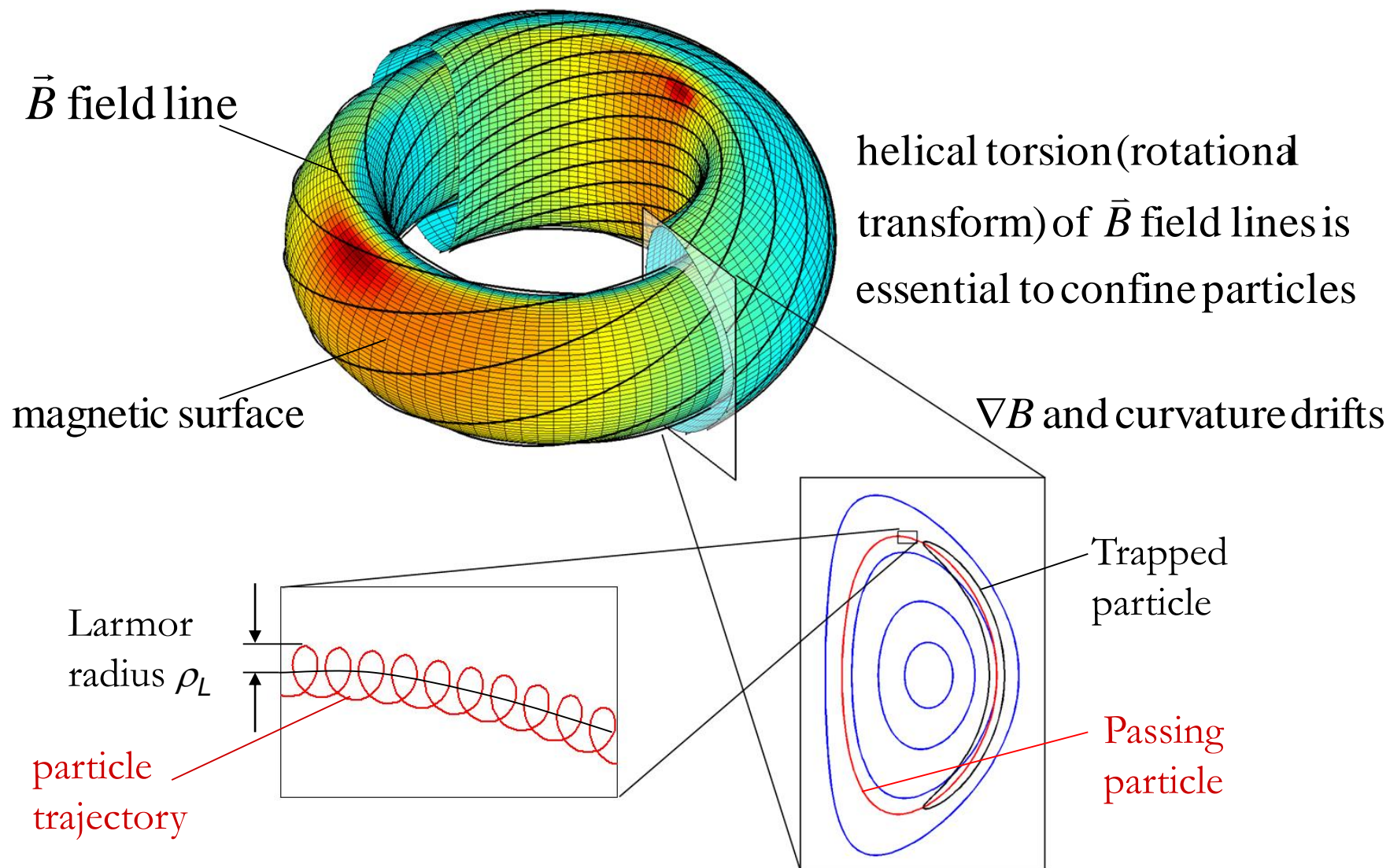
Periodic $V_0=500$ $n_v=40$ $n=24$ $E=1.42e+003$



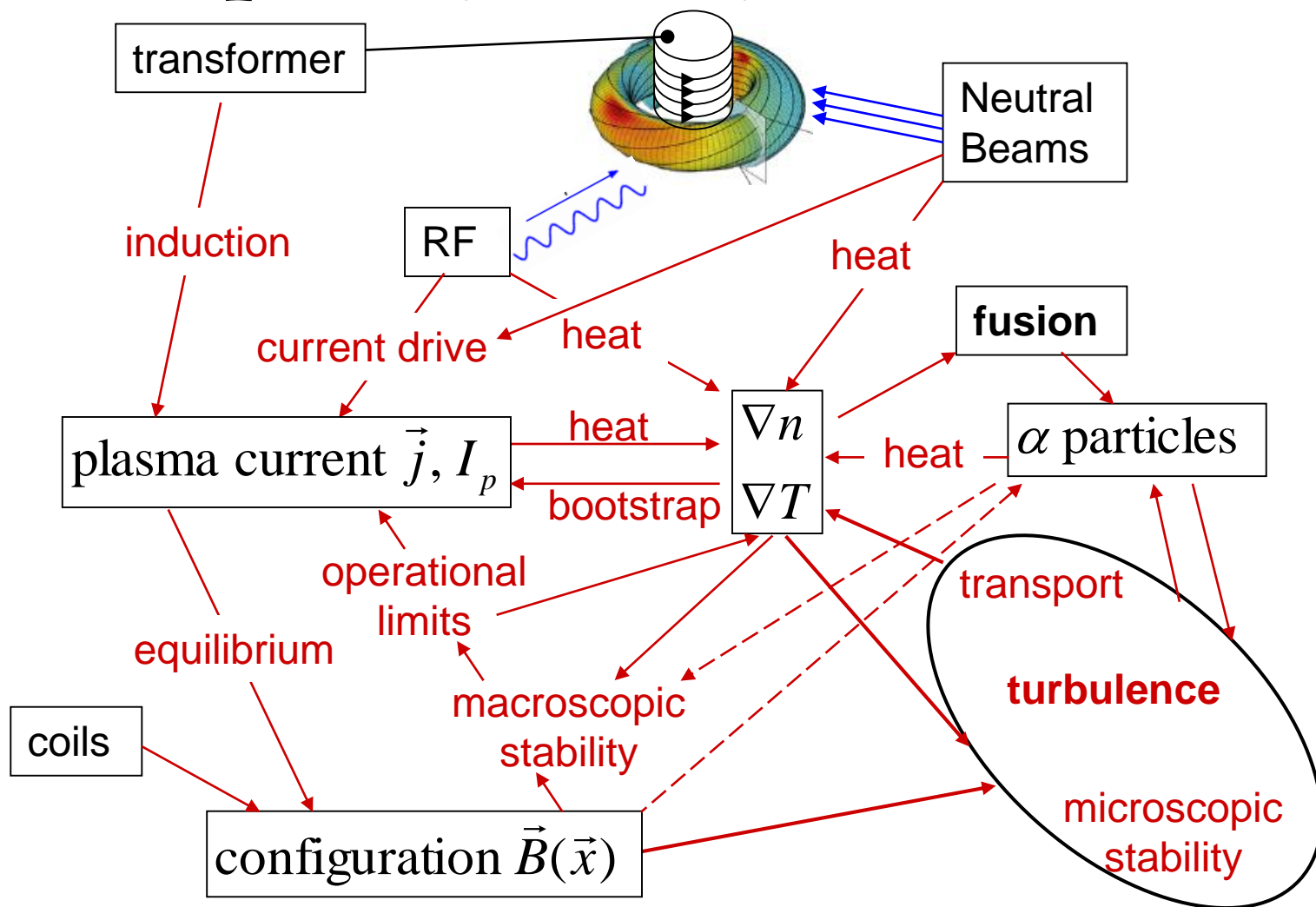
Physique Numérique des Plasmas de Fusion – Quelques Illustrations

Les méthodes numériques vues dans ce cours sont toutes utilisées dans les codes de simulation des plasmas ... avec des variantes...
... et d'autres méthodes aussi...

Magnetic confinement: tokamak

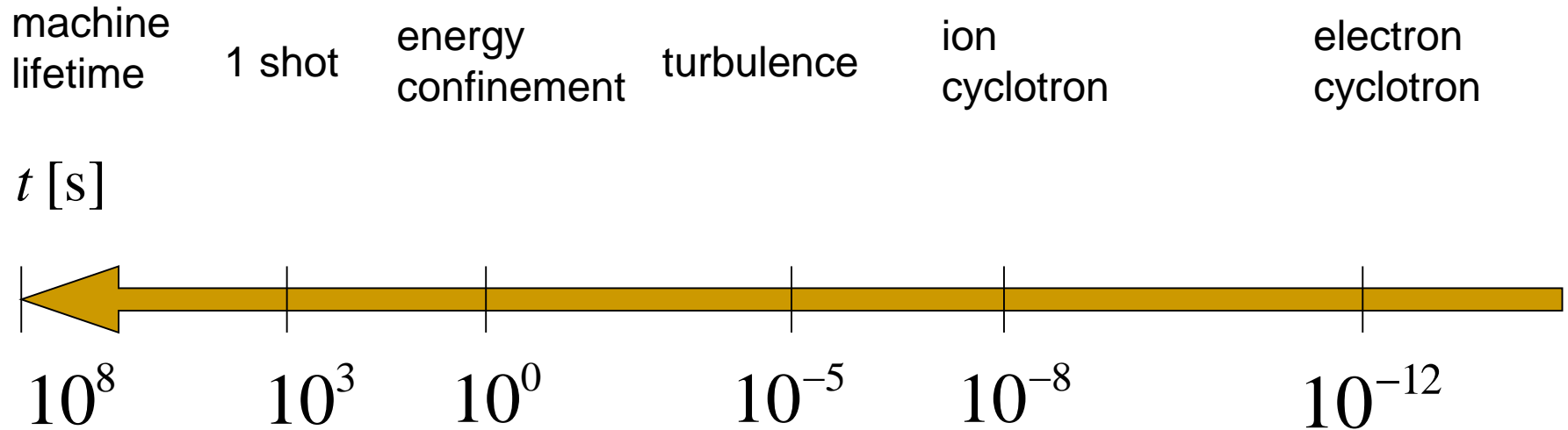


Complexity: many nonlinearities



- Geometry of magnetic configuration is an essential feature of fusion plasma physics

Timescales in magnetic fusion plasmas



- Physics spans several orders of magnitude
- Direct Numerical Simulation (DNS) of “everything” is unthinkable
 - Need to separate timescales using approximations
 - How to integrate all phenomena in a consistent manner?

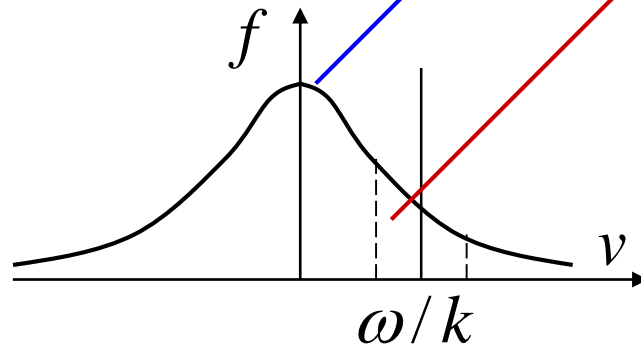
Kinetic effects: wave-particle interaction



Surfers with velocity too different from the phase velocity of the wave will not ride the wave

Surfers with velocity just below the phase velocity of the wave will be accelerated

-> momentum and energy transfer



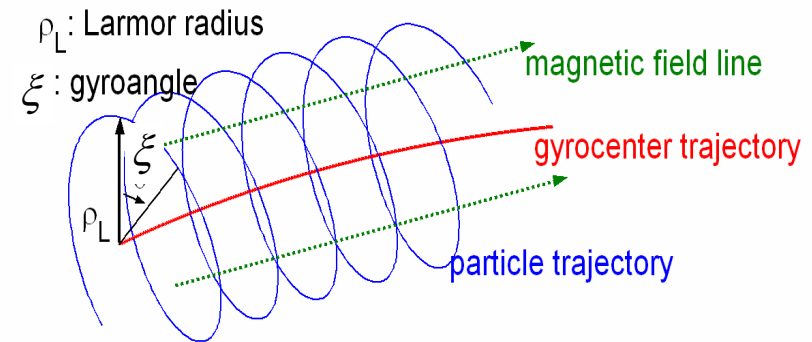
Net energy transfer from the wave to the particles if $\partial f / \partial v < 0$

Collisionless Landau damping

- General: distribution function in 6D phase space $f(\vec{x}, \vec{v}; t)$
- To be solved with consistent electromagnetic fields $\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}, t)$

Gyrokinetic model

- Assume $\omega_{\text{turbulence}} \ll \omega_{\text{ion cyclotron}}$
- Average out the fast motion of the particle around the guiding center
- Fast parallel motion, slow perpendicular motion (drifts)
- Strong anisotropy of turbulent perturbations (\parallel vs perp to \mathbf{B})



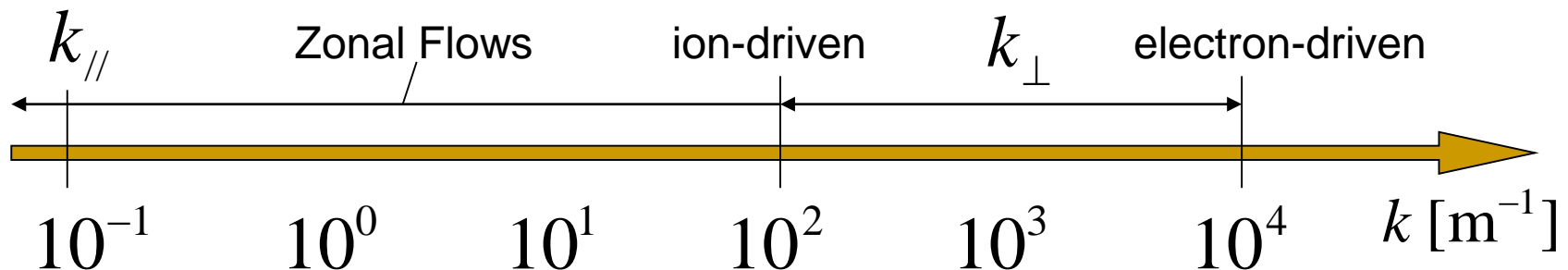
phase space dimension reduction
6D \rightarrow **5D**

$$f_s(\vec{q}, \vec{p}; t) \rightarrow \bar{f}_s(\vec{R}, \bar{u}, \bar{\mu}; t)$$

$$\vec{R} = \vec{q} - \vec{\rho}_s$$

$$u = v_{\parallel} + (e_s/cm_s)A_{\parallel}$$

$$\mu = m_s v_{\perp}^2 / 2B_0$$



Gyrokinetic equations

$$\frac{D\bar{f}_s}{Dt} = \frac{\partial \bar{f}_s}{\partial t} + \frac{d\bar{\mathbf{R}}}{dt} \cdot \frac{\partial \bar{f}_s}{\partial \bar{\mathbf{R}}} + \frac{d\bar{u}}{dt} \frac{\partial \bar{f}_s}{\partial \bar{u}} = 0$$

It is an advection equation along nonlinear characteristics:

$$\frac{d\bar{\mathbf{R}}}{dt} = \bar{u}\mathbf{b} - \frac{e_s}{cm_s} \langle A_{\parallel} \rangle_{\bar{\xi}} \frac{\mathbf{B}^*}{B_{\parallel}^*} + \frac{c}{e_s B_{\parallel}^*} \mathbf{b} \times (e_s \nabla \langle \Psi \rangle_{\bar{\xi}} + m_s \bar{u}^2 \mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} + \bar{\mu} \nabla B_0)$$

parallel motion (FAST) (red arrow pointing to $\bar{u}\mathbf{b}$)

drifts (SLOW) (blue arrows pointing to the drift terms)

magnetic and ExB nonlinearities (blue arrow pointing to $\langle A_{\parallel} \rangle_{\bar{\xi}}$)

parallel velocity nonlinearity (blue arrow pointing to $\langle \Psi \rangle_{\bar{\xi}}$)

curvature and grad-B (blue arrows pointing to $m_s \bar{u}^2 \mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b}$ and $\bar{\mu} \nabla B_0$)

mirror term (blue arrow pointing to $\bar{\mu} \nabla B_0$)

$$\frac{d\bar{u}}{dt} = - \frac{\mathbf{B}^*}{m_s B_{\parallel}^*} \cdot (e_s \nabla \langle \Psi \rangle_{\bar{\xi}} + \bar{\mu} \nabla B_0)$$

$$\frac{d\bar{\mu}}{dt} = 0 : \text{conservation of the magnetic moment}$$

$$\mathbf{B}^* = \mathbf{B}_0 + (B_0 \bar{u} / \Omega_s) \nabla \times \mathbf{b}$$

$$\Psi(\mathbf{R}, u, \mu, \xi, t) = \phi - u A_{\parallel} / c : \text{generalized potential}$$

Gyrokinetic perturbed field equations

- Poisson (or: quasi-neutrality) equation, here with Boltzmann electrons, linearized ion polarization density, long wavelength approx. $\sim O(k_{\perp}\rho_{Li})^2$

$$\underbrace{\frac{en_0}{T_e}(\delta\phi - \overline{\delta\phi})}_{\delta n_e} - \underbrace{\nabla_{\perp} \cdot \left(\frac{n_0}{B\Omega_i} \nabla_{\perp} \delta\phi \right)}_{\delta n_i^{pol}} = \langle \delta n_i \rangle$$

gyro-center perturbed ion density

$$\overline{\delta\phi} = \frac{\int \delta\phi J d\theta^* d\varphi}{\int J d\theta^* d\varphi} : \text{flux-surface-averaged potential}$$

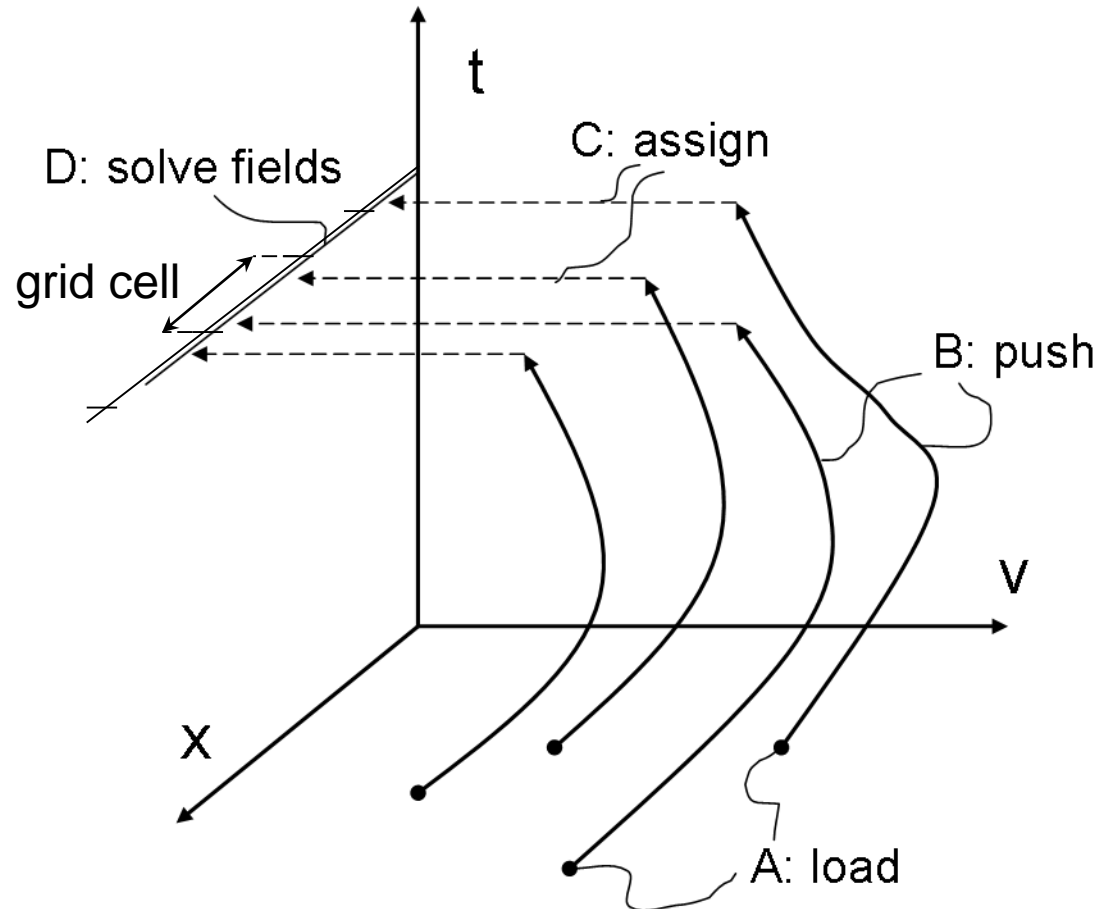
- Ampère's law, here neglecting δB_{\parallel} and expanding $\sim O(k_{\perp}\rho_{Li})^2$

$$\left(\frac{\beta_i}{\rho_{Li}^2} + \frac{\beta_e}{\rho_{Le}^2} \right) \delta A_{\parallel} - \nabla_{\perp} \cdot ((1 - \beta_i) \nabla_{\perp} \delta A_{\parallel}) = \mu_0 (\langle \delta \mathbf{j}_{\parallel i} \rangle + \langle \delta \mathbf{j}_{\parallel e} \rangle)$$

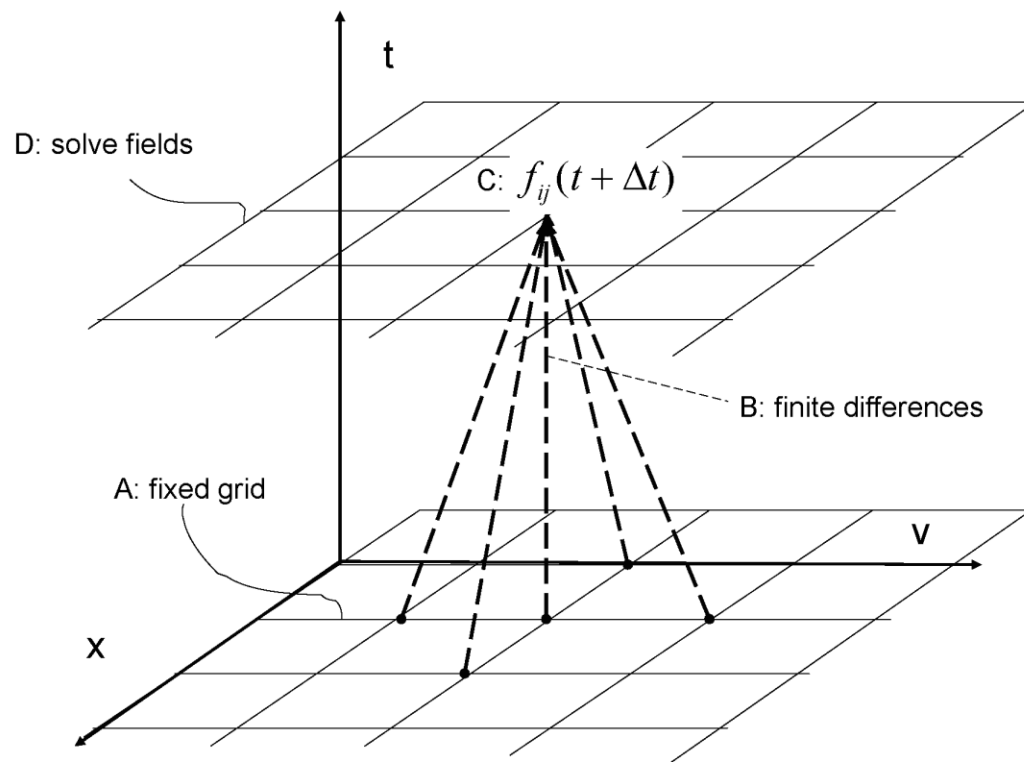
gyro-center perturbed ion and electron currents

Integral – partial differential system of equations, inhomogeneous, linear

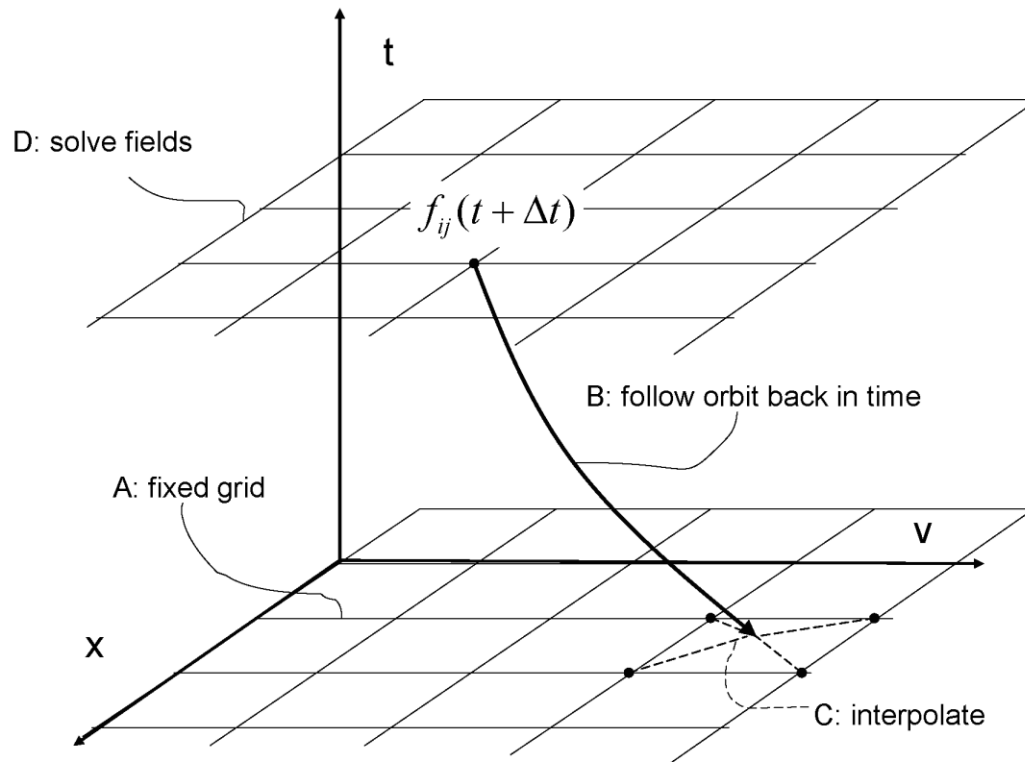
Lagrange “PIC”: essential steps



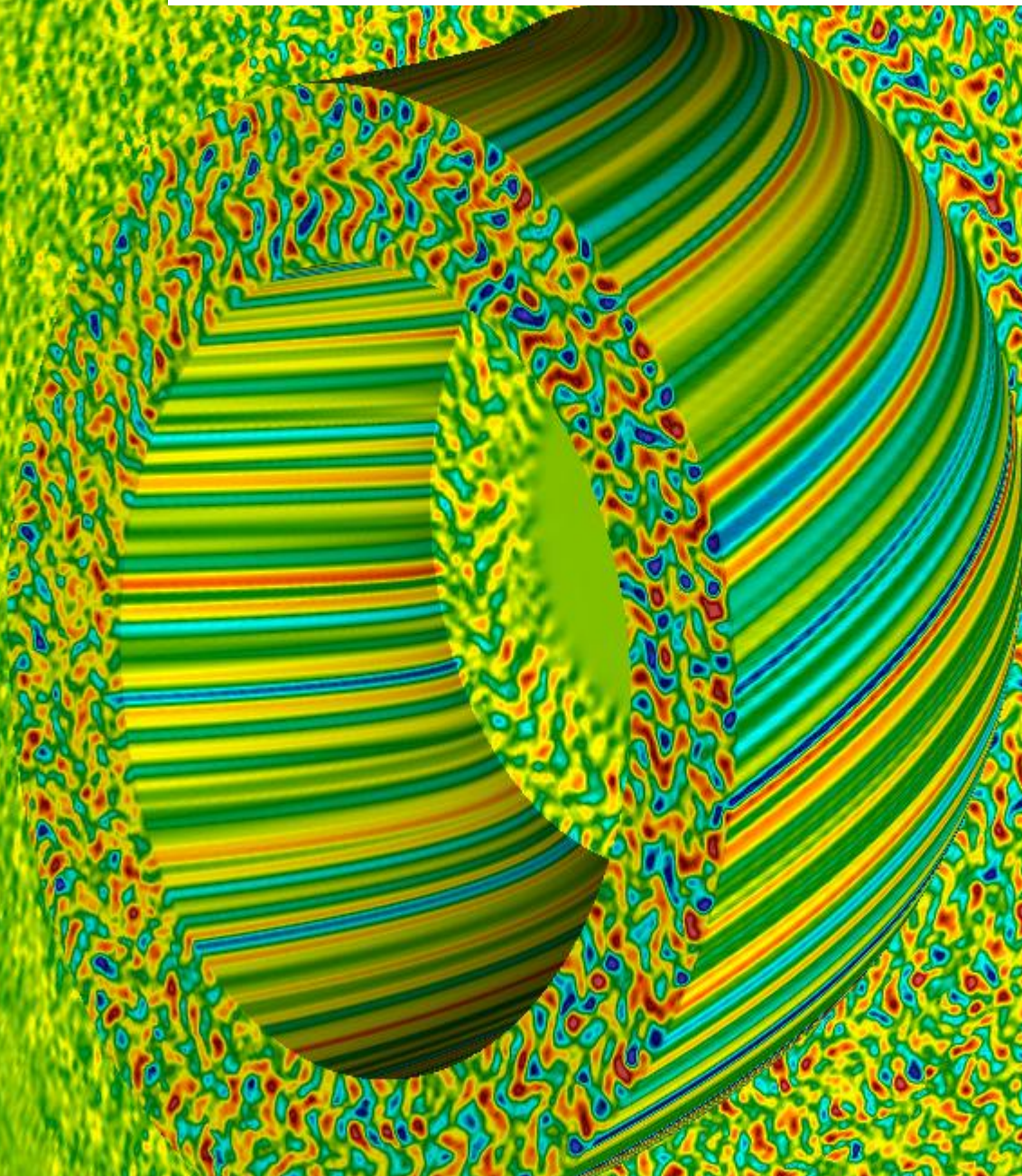
Euler (“Vlasov”) (“continuum”)



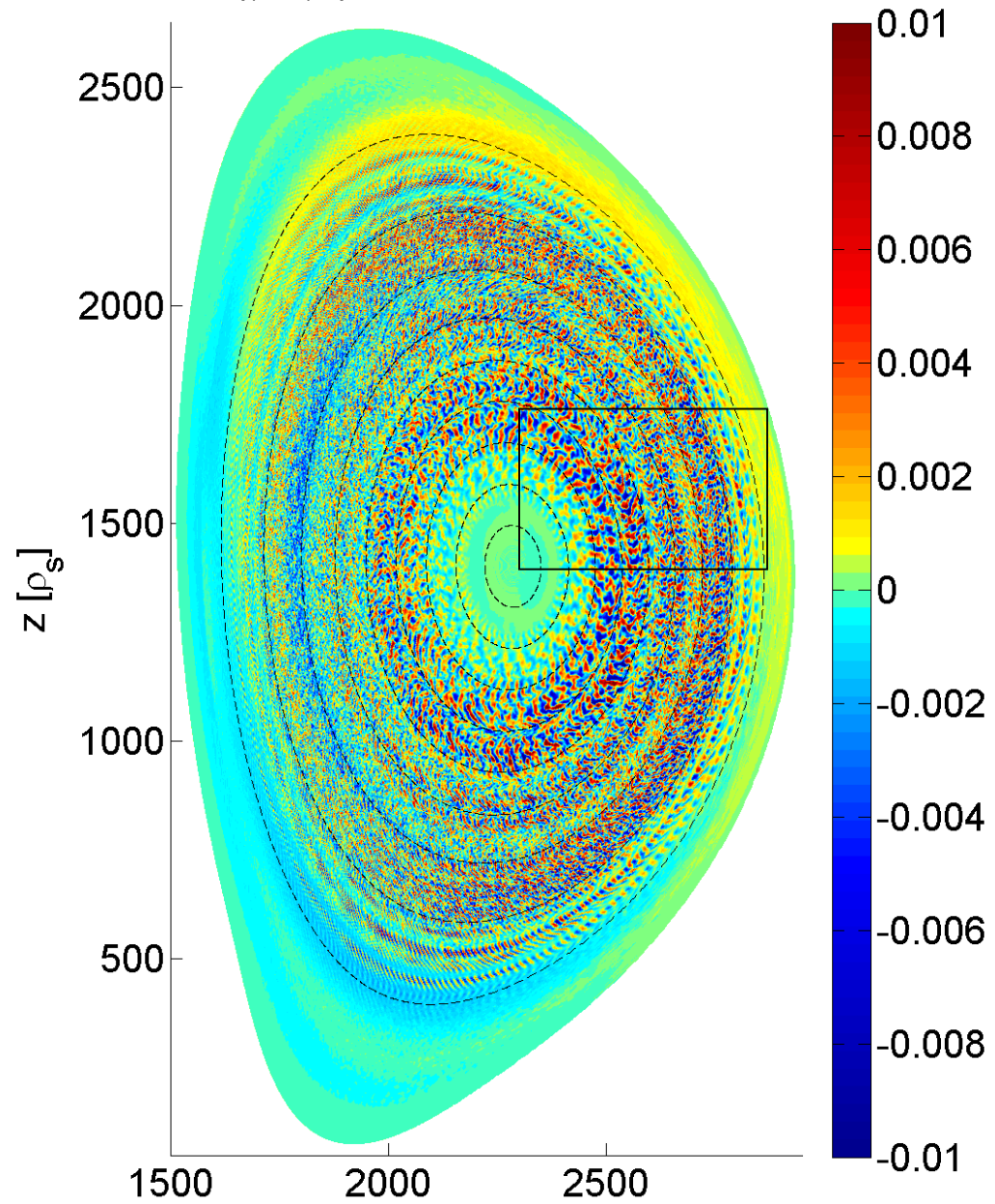
Semi-Lagrange



ITG turbulence in ITER



$(\phi - \langle \phi \rangle) / T_e$ at $t = 960000$ ORB5



Turbulence in
an ITER
plasma

2D slice
Snapshot

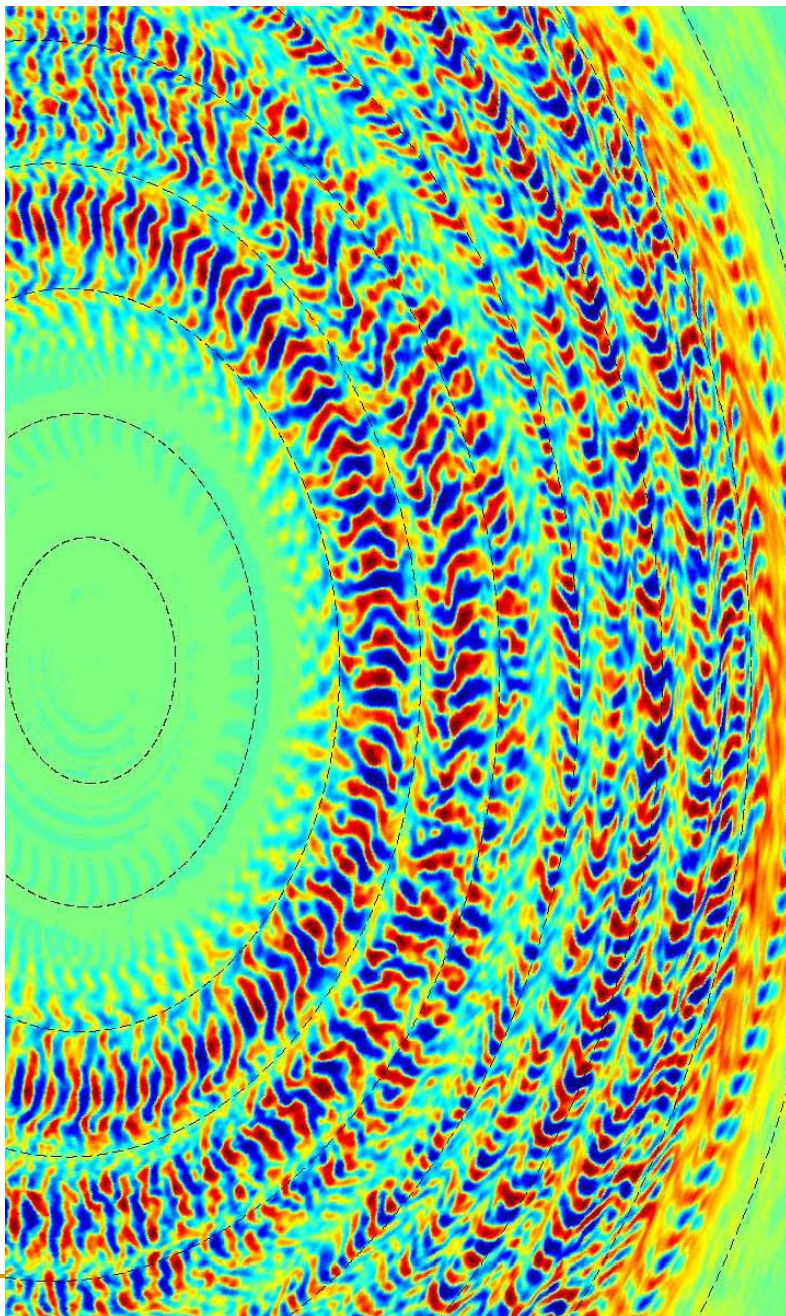
Contours of
density
perturbations

1G grid (3D)(*)

2G particles (5D)

HELIOS
1.5 PFlops

(*) more grid points on this 2D slice than pixels



Zonal Flows and turbulence

- Turbulence
 - zonal flows (ZF)
 - shearing turbulent eddies
 - turbulence suppression
- Self-organization
 - Radial structure of alternating bands of ZFs, related to regions of suppressed turbulence
- ITER plasma shaping
 - more effective turbulence suppression by ZFs than circular shaped plasmas (see next slide)

Physique Numérique

$B_1=0.018$ $\kappa=2e-05$ $\Omega=14.1$

