Physique Numérique – Semaine 10

Rappel de la semaine 9

- **4.1 Advection-Diffusion**
  - Limite de stabilité: critère CFL
- **4.2 Ondes**
  - Différences finies explicite à 3 niveaux
  - Limite de stabilité: critère CFL
- **Ex.5 - Vague dans un océan de profondeur variable**

Plan de la semaine 10

- **4.2 Ondes**
  - Analyse de stabilité de Von Neuman: critère CFL
  - Modes propres, fréquences propres. Excitation résonante.
  - Tsunamis. Quelle équation?
- **4.3 Schrödinger**
  - Schéma semi-implicite de Crank-Nicolson

Documentation

- Lecture pour la Semaine #10: Notes de cours
  - **Section 4.2 Ondes**
  - **Section 4.3.1 Schrödinger. Schéma semi-implicite**

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

Advection et diffusion. Différences finies. Schéma explicite 2 niveaux. Critères de stabilité numérique.

$$\boxed{0 \leq \beta \leq 1} \qquad \beta = v\frac{\Delta t}{\Delta x} \qquad \textbf{CFL}$$

Courant-Friedrichs-Lewy

$$\boxed{0 \leq \alpha \leq \frac{1}{2}} \qquad \alpha = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

La démonstration sera présentée ultérieurement. Voir Notes de Cours 4.1.3

Ondes – schéma numérique

- **Schéma différences finies explicite 3 niveaux**

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

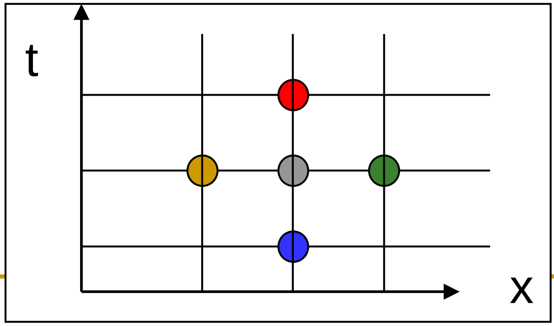
Discrétisation {(xi,tj)}

$$f_j'' = \frac{1}{h^2}\left(f_{j-1} - 2f_j + f_{j+1}\right) + \mathcal{O}(h^2) \qquad \text{(A.21)}$$

$$\frac{f(x_i,t_{n+1}) - 2f(x_i,t_n) + f(x_i,t_{n-1})}{(\Delta t)^2} \approx u^2 \left(\frac{f(x_{i+1},t_n) - 2f(x_i,t_n) + f(x_{i-1},t_n)}{(\Delta x)^2}\right) \qquad (4.40)$$

$$\boxed{\beta = u\frac{\Delta t}{\Delta x}}$$

$$\boxed{f(x_i,t_{n+1}) \approx 2\left(1-\beta^2\right) f(x_i,t_n) - f(x_i,t_{n-1}) + \beta^2\left[f(x_{i+1},t_n) + f(x_{i-1},t_n)\right]} \qquad (4.42)$$



Ondes en milieu homogène, 1D

- Quelques démonstrations en «live»
  - Initialisation: immobile, progressive, rétrograde
  - Conditions aux limites: fixes, «libres», sortie
  - Réflexions
  - Superpositions
  - **Ondes stationnaires, modes propres, fréquences propres**
  - **Excitation résonante**

Modes propres, fréquences propres

- Mode propre: mvmt particulier du système homogène (i.e. SANS excitation extérieure) pour lequel TOUS les degrés de liberté oscillent à la même fréquence, appelée fréquence propre.
- De démonstrations seront faites en simulation.
- Principe de superposition: la somme algébrique de 2 modes propres est également solution du système homogène.

Modes et fréquences propres – Solution générale

$$\boxed{\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}}$$

Séparation des variables $f(x,t) = A(x)B(t)$

$$A(x)\frac{d^2 B}{dt^2}(t) = u^2 \frac{d^2 A}{dx^2}(x)B(t) \qquad \frac{1}{B}\frac{d^2 B}{dt^2}(t) = u^2 \frac{1}{A}\frac{d^2 A}{dx^2}(x)$$

fct(t) = fct(x) = const =C

$$\boxed{\frac{d^2}{dt^2}B(t) = C\,B(t)}$$

B(t) est fonction propre de l'opérateur $\frac{d^2}{dt^2}$ de valeur propre C

$$\boxed{B(t) = \hat{B}e^{-i\omega t}} \Rightarrow -\omega^2 \hat{B}e^{-i\omega t} = C\hat{B}e^{-i\omega t} \Rightarrow C = -\omega^2$$

$$\boxed{\frac{d^2}{dx^2}A(x) = \frac{-\omega^2}{u^2}A(x)}$$

A(x) est fonction propre de l'opérateur $\frac{d^2}{dx^2}$ de valeur propre $-\omega^2/u^2$

$$\boxed{A(x) = \hat{A}e^{ikx}} \Rightarrow -k^2 \hat{A}e^{ikx} = -\left(\omega^2/u^2\right)\hat{A}e^{ikx}$$

Modes et fréquences propres – Solution générale

$$\boxed{k^2 = \frac{\omega^2}{u^2}}$$ **Relation de dispersion** $$\omega = \pm k u, \quad k = \pm \frac{\omega}{u}$$

La solution générale s'écrit

$$f(x,t) = \left(Ae^{-i\omega t} + Be^{i\omega t}\right)\left(Ce^{ikx} + De^{-ikx}\right)$$

$$= \bar{A}e^{i(kx-\omega t)} + \bar{B}e^{i(-kx-\omega t)} + \bar{C}e^{i(kx+\omega t)} + \bar{D}e^{i(-kx+\omega t)} \qquad \textbf{(*)}$$

Les conditions initiales et aux bords déterminent les constantes d'intégration.

P.ex., onde purement progressive → $f(x,t) = F(x - ut),\ \forall x, \forall t,$

$$\bar{B} = 0, \quad \bar{C} = 0 \quad \Rightarrow f(x,t) = \bar{A}e^{ik(x-\frac{\omega}{k}t)} + \bar{D}e^{-ik(x-\frac{\omega}{k}t)}$$

Ainsi, la méthode de séparation des variables permet de trouver non seulement des ondes stationnaires, mais aussi des ondes propageantes

Signes de ω et de k … ? De C dans R…

La solution physique s'obtient en prenant la partie réelle de la représentation complexe.
En poursuivant notre exemple de l'onde progressive, en posant

$$\xi = kx - \omega t,\ \bar{A} = a + ib,\ \bar{D} = d + ig$$

on obtient

$$f(x,t) =$$

$$(a+d)\cos\xi + (g-b)\sin\xi = \tilde{A}\cos\xi + \tilde{B}\sin\xi = A_0\cos(\xi + \varphi_0)\ .$$

Il reste donc bien 2 constantes d'intégration réelles.

On peut faire le même type d'analyse, en partant de l'Eq.(*) de la page précédente, pour d'autres situations, p.ex conditions aux limites Dirichlet ou Neumann → onde stationnaire, quantification. (voir Exercice 5).

Modes et fréquences propres – conditions aux bords

- Pour l'exercice 5, on prend des conditions aux bord ***fixe (Dirichlet) à gauche et «libre» (Neumann) à droite***.
- On applique ces conditions aux bords à la solution générale.
- Cela conduit à une ***quantification*** des fréquences possibles, appelées ***fréquences propres.***
- La fonction spatiale correspondant à chaque fréquence propre est appelée fonction propre ou ***mode propre.***

Modes et fréquences propres – superposition

La **fonction propre** correspondant à cette fréquence propre ω_n est:

$$\boxed{f_n(x,t) = \hat{A}_n \underbrace{\sin(k_n x)}_{\text{Dépendance spatiale de la fonction propre}} \underbrace{\exp(-i\omega_n t)}_{\text{Dépendance temporelle de la fonction propre: oscillation à la fréqeuce } \omega_n}}$$

$$\hat{A}_n = |\hat{A}_n| e^{i\varphi_n} \in C$$

Dépendance spatiale de la fonction propre

Dépendance temporelle de la fonction propre: oscillation à la fréqeuce ω_n

L'équation d'onde étant linéaire, toute superposition linéaire de solutions est aussi une solution. Ainsi, la solution générale (mais satisfaisant les conditions aux bords) peut s'écrire comme superposition de modes propres:

$$\boxed{f(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \hat{A}_n \sin(k_n x) \exp(-i\omega_n t)}$$

Les coefficients (complexes) A_n sont déterminés par les **conditions initiales**

Superposition de modes propres – conditions initiales

- Dans cet exemple, on prend des conditions aux initiales ***au repos***.

$$\begin{cases} f(x,0) = f_{init}(x) \\ \dfrac{\partial f}{\partial t}(x,0) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} |\hat{A}_n| \cos(\varphi_n) \sin(k_n x) = f_{init}(x) \\ \displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} -|\hat{A}_n| \sin(k_n x) \omega_n \sin(\varphi_n) = 0 \end{cases}$$

De la 2e éq, satisfaite pour tout x, on tire : $\sin(\varphi_n) = 0 \Rightarrow \cos(\varphi_n) = \pm 1 \equiv \sigma_n$

Et donc, on peut écrire la 1e Eq: $\boxed{\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n |\hat{A}_n| \sin(k_n x) = f_{init}(x)}$

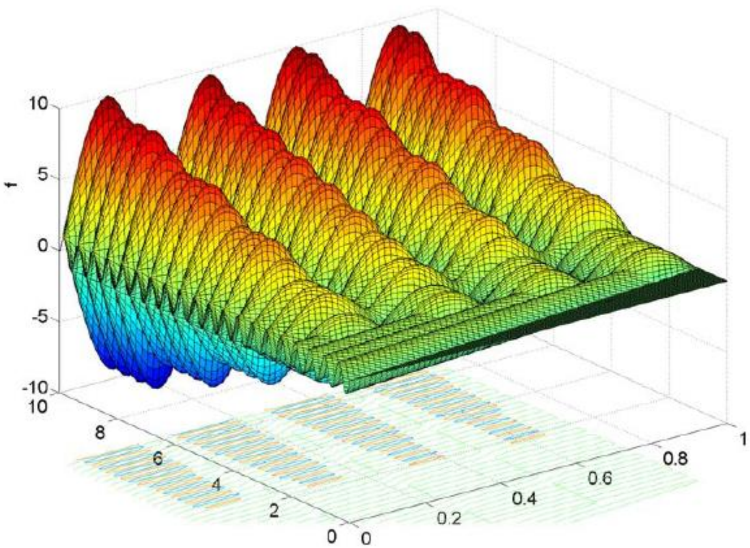
Les $\sigma_n|A_n|$ sont donc les **coefficients de la série de Fourier de f_{init}**

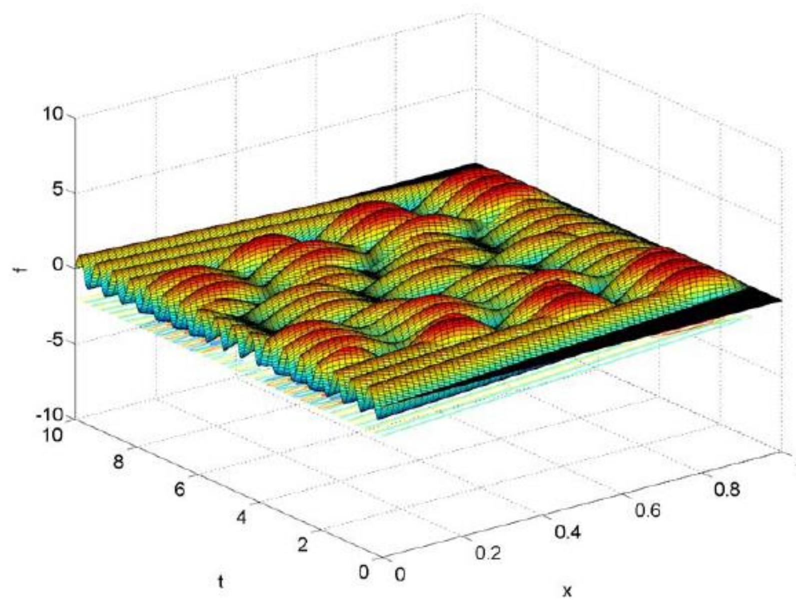
Démonstrations (simulations «live»)

- www.falstad.com
  - Math and Physics aplets
    - loadedstring
- Recherche de modes propres et fréquences propres par excitation résonante

Ondes - excitation

- **Recherche de modes propres**





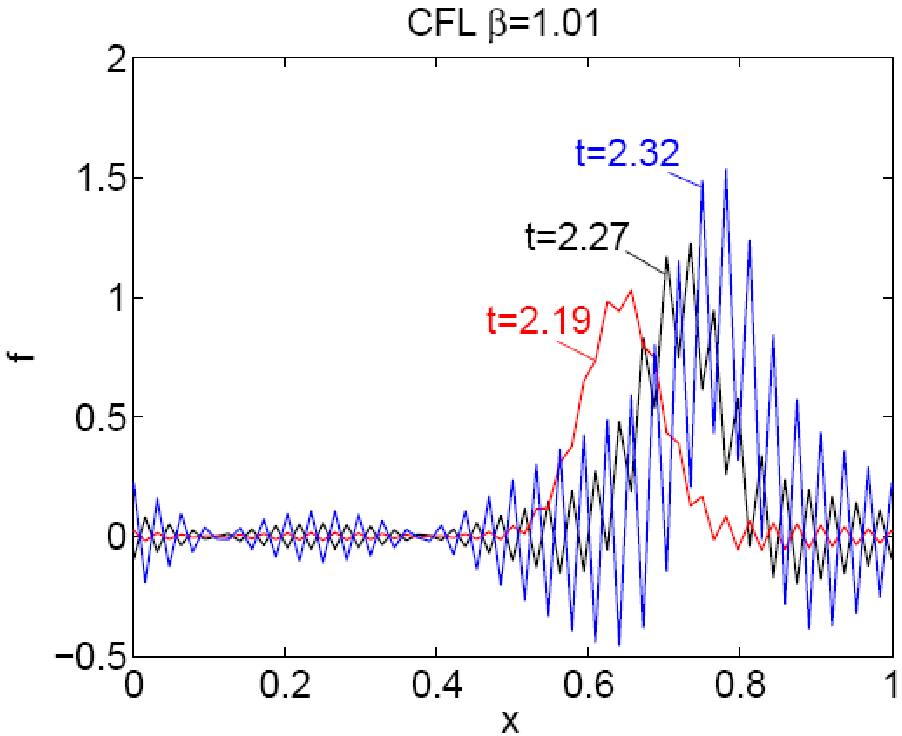
$$\omega = 4\frac{\pi\, u}{x_r - x_l}$$

$$\omega = 3.6\frac{\pi\, u}{x_r - x_l}$$

Ondes – instabilité numérique

- **4.2.2 Stabilité du schéma différences finies explicite 3 niveaux pour l'équation d'ondes**

Condition de stabilité CFL $\boxed{0 \leq \beta^2 \leq 1}$ $\boxed{\beta = u\frac{\Delta t}{\Delta x}}$

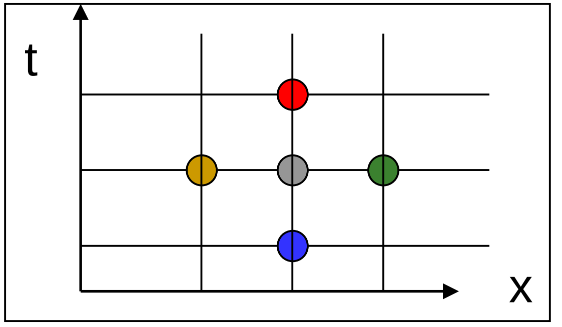


$$\boxed{\beta = 1.01}$$

Ondes – instabilité numérique

- Le mode instable est une ***oscillation*** dans l'espace (avec 2 pts de maillage x_i par longueur d'onde) et le temps (2 pts de maillage t_j par période) dont ***l'amplitude croît exponentiellement***
- On fera la démonstration au tableau du critère de stablilité CFL: analyse de ***Von Neumann – voir aussi section 4.2.2***

Ondes – Analyse de stabilité Von Neumann



$$\boxed{\beta = u\frac{\Delta t}{\Delta x}}$$

$$f(x_i, t_{n+1}) \approx 2(1-\beta^2) f(x_i, t_n) - f(x_i, t_{n-1}) + \beta^2 \left(f(x_{i+1}, t_n) + f(x_{i-1}, t_n) \right)$$

(4.43)

Ansatz: on cherche une solution de (4.43) de type ondulatoire, avec la possibilité d'avoir une amplitude exponentielle dans le temps

$$f(x_i, t_n) = \hat{f} \exp\{i(kx_i - \omega t_n)\}, \ \hat{f} \in C, k \in R, \quad \omega \in C \quad (4.26)$$

On définit le «gain» G: $f(x_i, t_{n+1}) = G f(x_i, t_n), \quad G = e^{-i\omega\Delta t}$

Condition de stabilité: $|G| \leq 1, \forall k, \forall \omega$

Analyse de stabilité de Von Neumann

Ondes. Explicite 3 niveaux. Stabilité

Introduisant (4.26) dans (4.43) :

$$\hat{f}\, e^{i(kx_i - \omega(t_n+\Delta t))} =$$

$$2(1-\beta^2)\hat{f}\, e^{i(kx_i-\omega t_n)} - \hat{f}\, e^{i(kx_i - \omega(t_n-\Delta t))}$$

$$+\beta^2\left[\hat{f}\, e^{i(k(x_i+\Delta x)-\omega t_n)} + \hat{f}\, e^{i(k(x_i-\Delta x)-\omega t_n)}\right]$$

En posant $G = e^{-i\omega\Delta t}$ (on note que $e^{+i\omega\Delta t} = \frac{1}{G}$), factorisant $\hat{f}\, e^{i(kx_i-\omega t_n)}$ et utilisant $e^{ik\Delta x} + e^{-ik\Delta x} = 2\cos(k\Delta x) = 2\left(1-2\sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)\right)$ posant $\theta = \frac{k\Delta x}{2}$, on obtient :

$$G = 2 - 2\beta^2 - \frac{1}{G} + \beta^2(2 + 4\sin^2\theta) \Rightarrow$$

$$G^2 - 2(1-2\beta^2\sin^2\theta)\,G + 1 = 0 \Rightarrow$$

$$G = 1 - 2\beta^2\sin^2\theta \pm \sqrt{\Delta}, \text{ avec}$$

$$\Delta = (1-2\beta^2\sin^2\theta)^2 - 1 .$$

On rappelle que le critère de stabilité est $|G| \leq 1$.

- Si $\beta^2 \leq 1$, alors $\sin^2\theta \leq 1 \Rightarrow 2\beta^2\sin^2\theta \leq 2$

$\Rightarrow (1-2\beta^2\sin^2\theta)^2 \leq 1 \Rightarrow \Delta \leq 0$

et donc

$$G = 1 - 2\beta^2\sin^2\theta \pm i\sqrt{1-(1-2\beta^2\sin^2\theta)^2}$$

$$\Rightarrow |G|^2 = (1-2\beta^2\sin^2\theta)^2 + 1 - (1-2\beta^2\sin^2\theta)^2$$

$$\Rightarrow |G|^2 = 1, \ \forall\theta \Rightarrow \text{STABLE}$$

- Si $\beta^2 > 1$, alors, pour $\sin\theta = 1$,

$$\Delta = (1-2\beta^2)^2 - 1 > 0$$

$$\Rightarrow G = 1 - 2\beta^2 \pm \sqrt{\Delta}$$

On a $1-2\beta^2 < -1$, et en prenant la solution $-\sqrt{\Delta}$, on a $G < -1$, et donc $|G| > 1 \Rightarrow$ INSTABLE

Ondes, schéma explicite 3 niveaux - stabilité

$$\boxed{\beta = u\frac{\Delta t}{\Delta x}}$$

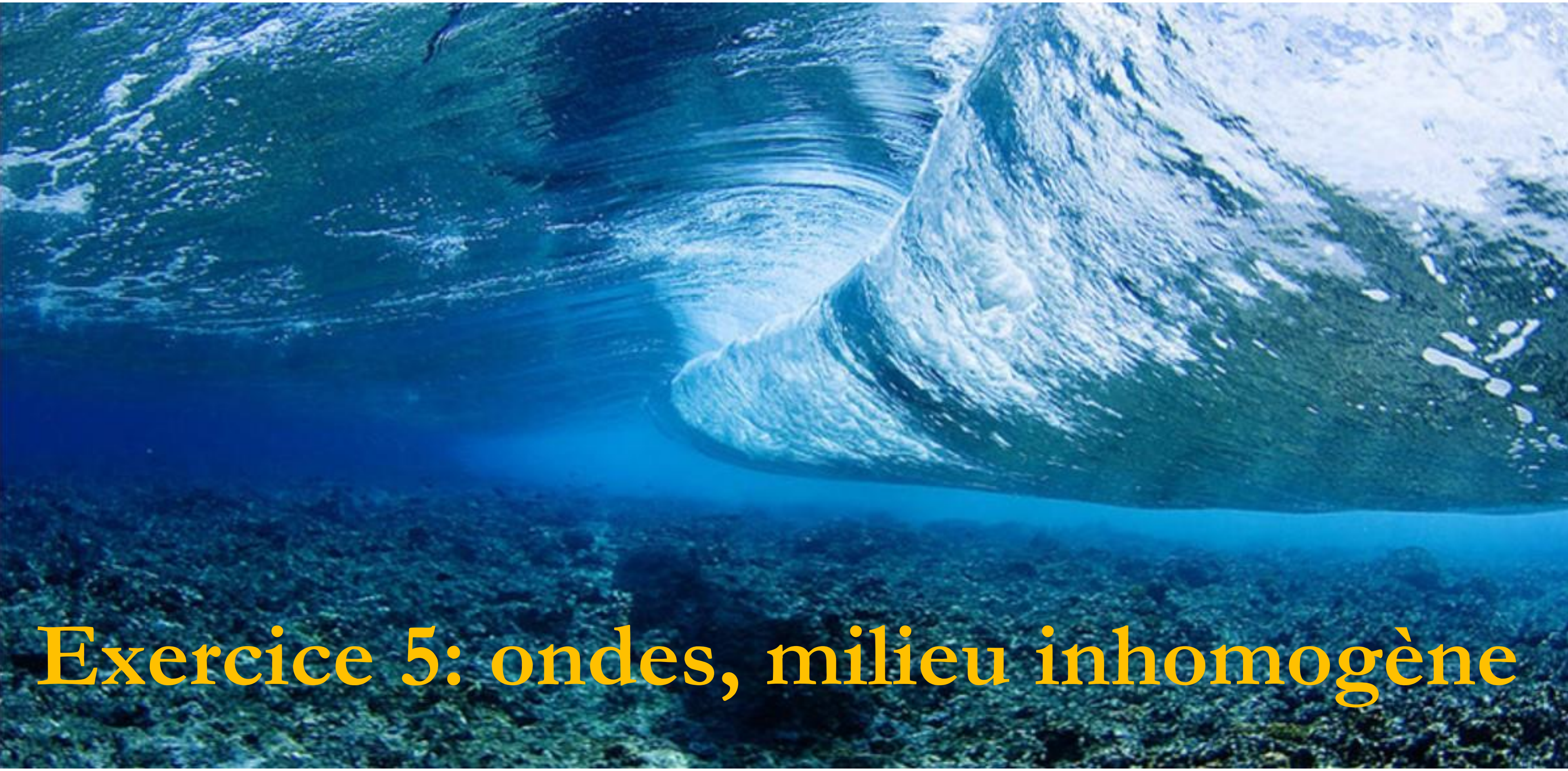
$$\boxed{\text{Si } \beta^2 \leq 1,\ |G|^2 = 1 \Rightarrow \text{stable}}$$

$$\boxed{\text{Si } \beta^2 > 1, \text{alors, pour} \sin^2\theta = 1, G < -1 \Rightarrow \text{instable}}$$

$$\theta = k\,\Delta x / 2 \qquad \sin^2\theta = 1 \Rightarrow \frac{k\Delta x}{2} = \frac{\pi}{2}$$

$$k = 2\pi/\lambda \quad \Rightarrow \quad \boxed{\lambda = 2\Delta x}$$

- 2 points de maillage par longueur d'onde, c'est bien ce que l'on a observé sur les simulations instables!

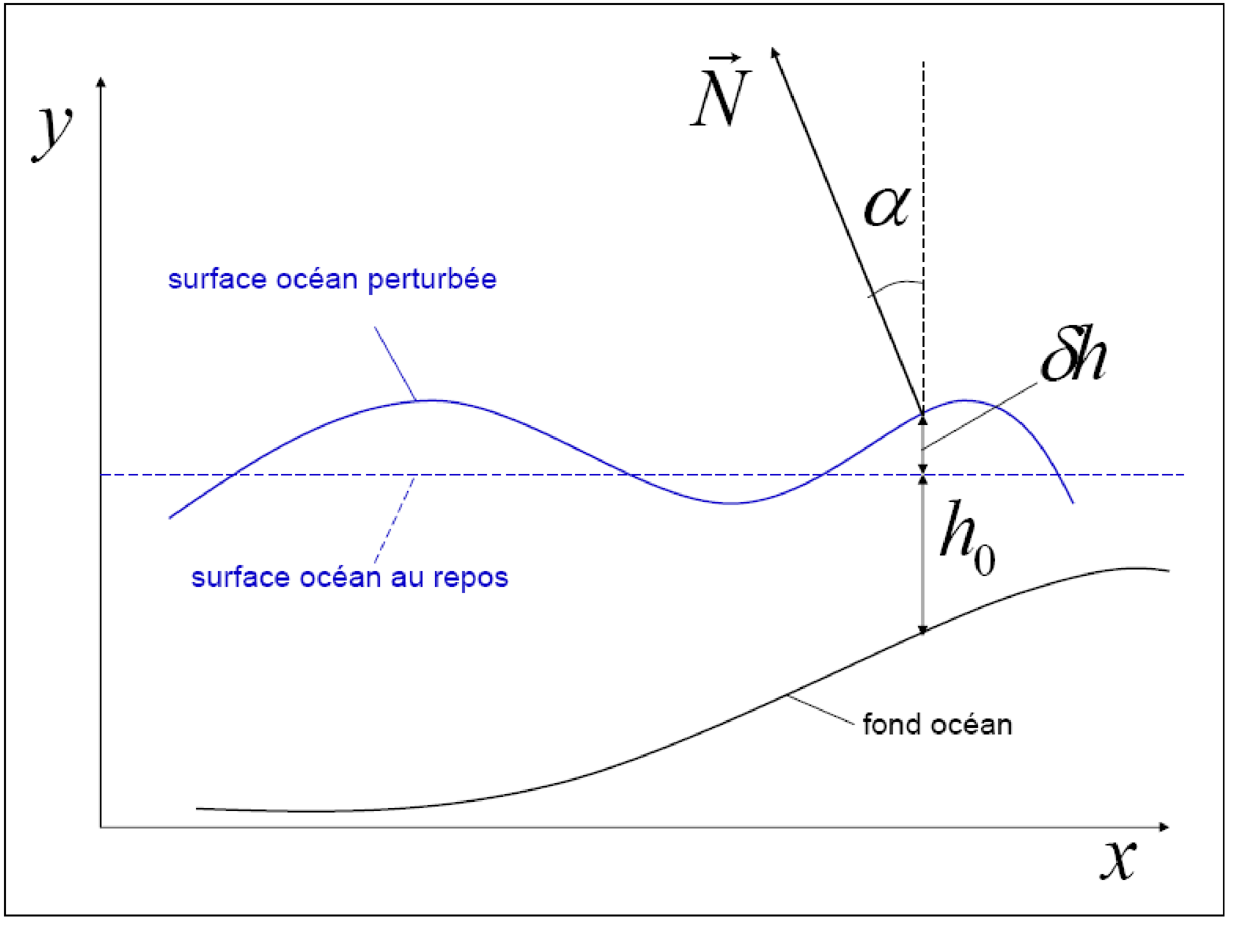


Exercice 5: ondes, milieu inhomogène

- Equations
- **Solution analytique approximative: méthode WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin)**
- Simulations numériques et comparaison

Equations en eaux peu profondes

- Voir Annexe E des Notes de Cours + au tableau



$$\rho_0 \frac{d\vec{v}}{dt} = -\nabla P + \rho_0 \vec{g} \quad \text{(E.3)}$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (h\vec{v}) = 0 \quad \text{(E.4)}$$

1D: $-\frac{\partial (v_x h)}{\partial x} = \frac{\partial h}{\partial t}$

Hypothèses:

- fluide parfait, incompressible
- 1D
- Eaux peu profondes: $h_0 << \lambda$
- Petites perturbations → linéarisation

$\alpha << 1$

$\left|\frac{dv_y}{dt}\right| << g$

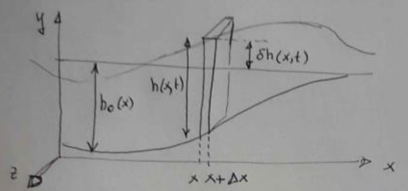
$$h(x,t) = h_0(x) + \delta h(x,t)$$

$$\vec{v}(x,t) = 0 + \delta\vec{v}(x,t)$$

Présentation au tableau

Ondes en eaux "peu profondes", profondeur variable

On considère une tranche de fluide d'épaisseur Δx, largeur L selon z, et on note sa hauteur $h(x,t)$.



On note $h_0(x)$ la profondeur de l'océan à l'équilibre, et $h(x,t) = h_0(x) + \delta h(x,t)$.

Le fluide est supposé incompressible, donc son volume est conservé. La variation de volume à travers les faces latérales de la tranche de fluide, par unité de temps, est :

$$-v_x(x,t)\,h(x,t)\,L + v_x(x+\Delta x,t)\,h(x+\Delta x,t)\,L. \quad (1)$$

La variation de volume de la tranche de fluide par unité de temps, due à son mouvement vertical, est

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t}\,\Delta x\,L. \quad (2)$$

La variation totale implique $(1)+(2)=0$.
En divisant par L, puis par Δx, et faisant $\lim \Delta x \to 0$, on obtient

$$\boxed{\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(v_x h) = 0} \quad (E.4)$$

C'est, en 1D, l'Eq. (E.4) des notes de cours. L'autre équation fondamentale est l'Eq. d'Euler (Navier-Stokes en négligeant la viscosité) :

$$\boxed{\rho\frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{\nabla}P + \rho_0\vec{g}} \quad (E.3)$$

On résout ces équations avec les hypothèses "d'eaux peu profondes" (en fait : $h_0 \ll \lambda$), impliquant que l'accélération verticale $\left|\frac{dv_y}{dt}\right| \ll g$

et que les perturbations sont "petites" ; écrivant :

$$h(x,t) = h_0(x) + \delta h(x,t)$$
$$\vec{v}(x,t) = 0 + \delta\vec{v}(x,t)$$

on négligera les termes en δh^2, $\delta h\,\delta v$, $(\delta v)^2$, etc, ce qui veut dire : on linéarisera les équations.

Ecrivant (E.3) selon x et selon y :

$$\begin{cases} \rho_0 \dfrac{dv_x}{dt} = -\dfrac{\partial P}{\partial x} & (5) \\ \rho_0 \dfrac{dv_y}{dt} = -\dfrac{\partial P}{\partial y} - \rho_0 g. & (6) \end{cases}$$

La surface de l'eau est une isobare ; $\vec{\nabla}P \perp$ surfa[ce]

$$\Rightarrow \frac{\partial P/\partial x}{-\partial P/\partial y} = \tan\alpha = \frac{\partial \delta h}{\partial x} \quad (7)$$

Combinant (5)(6)(7), négligeant $\frac{dv_y}{dt}$ dans (6),

$$\rho_0\frac{dv_x}{dt} = -\rho_0 g\frac{\partial \delta h}{\partial x}$$

On se rappelle que d/dt est la dérivée totale, ou dérivée convective, qui est $\partial/\partial t + \vec{v}\cdot\vec{\nabla}$, et donc

$$\boxed{\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x\frac{\partial v_x}{\partial t} = -g\frac{\partial \delta h}{\partial x}} \quad (8)$$

Nous avons donc le système d'équations (E.4)(8).
En linéarisant, on obtient :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \delta v_x}{\partial t} = -g\dfrac{\partial \delta h}{\partial x} \\ \dfrac{\partial \delta h}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x}(h_0\,\delta v_x) = 0 . \end{cases}$$

Dérivant par rapport au temps $(\partial/\partial t)$ cette dernière équation, et substituant $\partial\delta v_x/\partial t$ de la première,

$$\frac{\partial^2 \delta h}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x}\left(h_0\left(-g\frac{\partial \delta h}{\partial x}\right)\right) = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial^2 \delta h}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial x}\left(g h_0\frac{\partial \delta h}{\partial x}\right) = 0}$$

La vitesse de propagation est $u(x) = \sqrt{g\,h_0(x)}$

(Pour $h_0 = 7000$ m, $u = 262$ m/s $= 944$ km/h !)

Profondeur variable $h_0(x)$ $u(x) = \sqrt{g h_0(x)}$

Vitesse de propagation variable u(x)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - u^2(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\delta h) = 0 \quad (A)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - \frac{\partial}{\partial x}\left(u^2(x)\frac{\partial}{\partial x}\delta h\right) = 0 \quad (B)$$

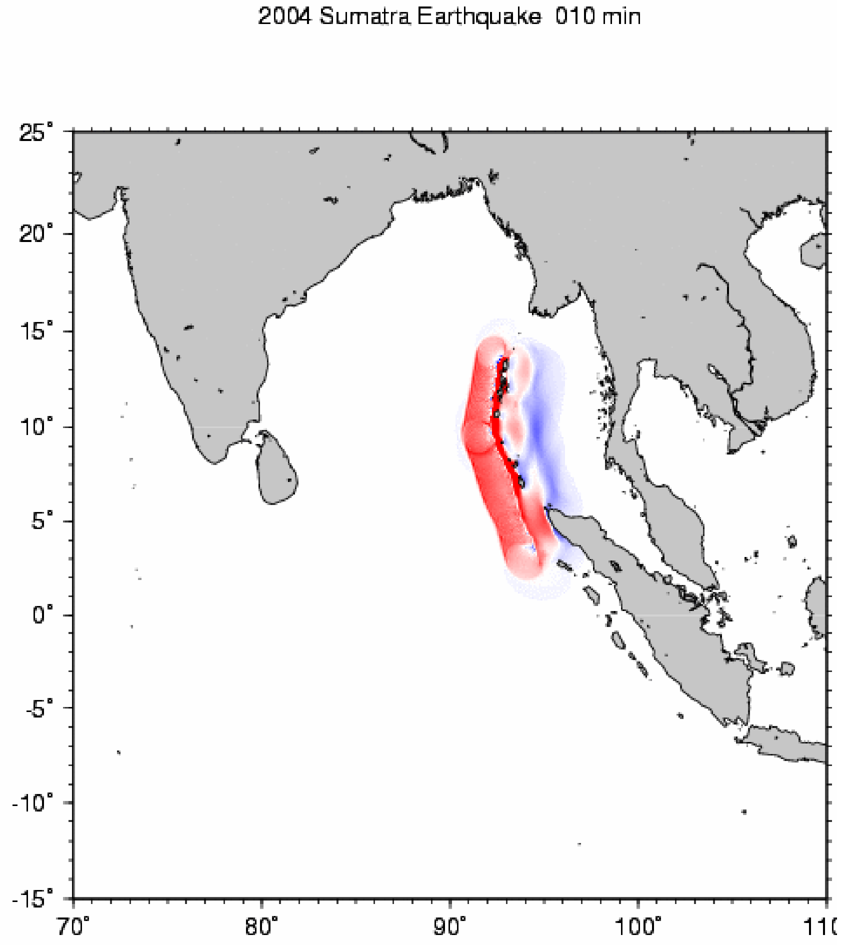
$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(u^2(x)\,\delta h\right) = 0 \quad (C)$$

Laquelle de ces équations est correcte?

Cela fait-il une différence sur la propagation du tsunami?

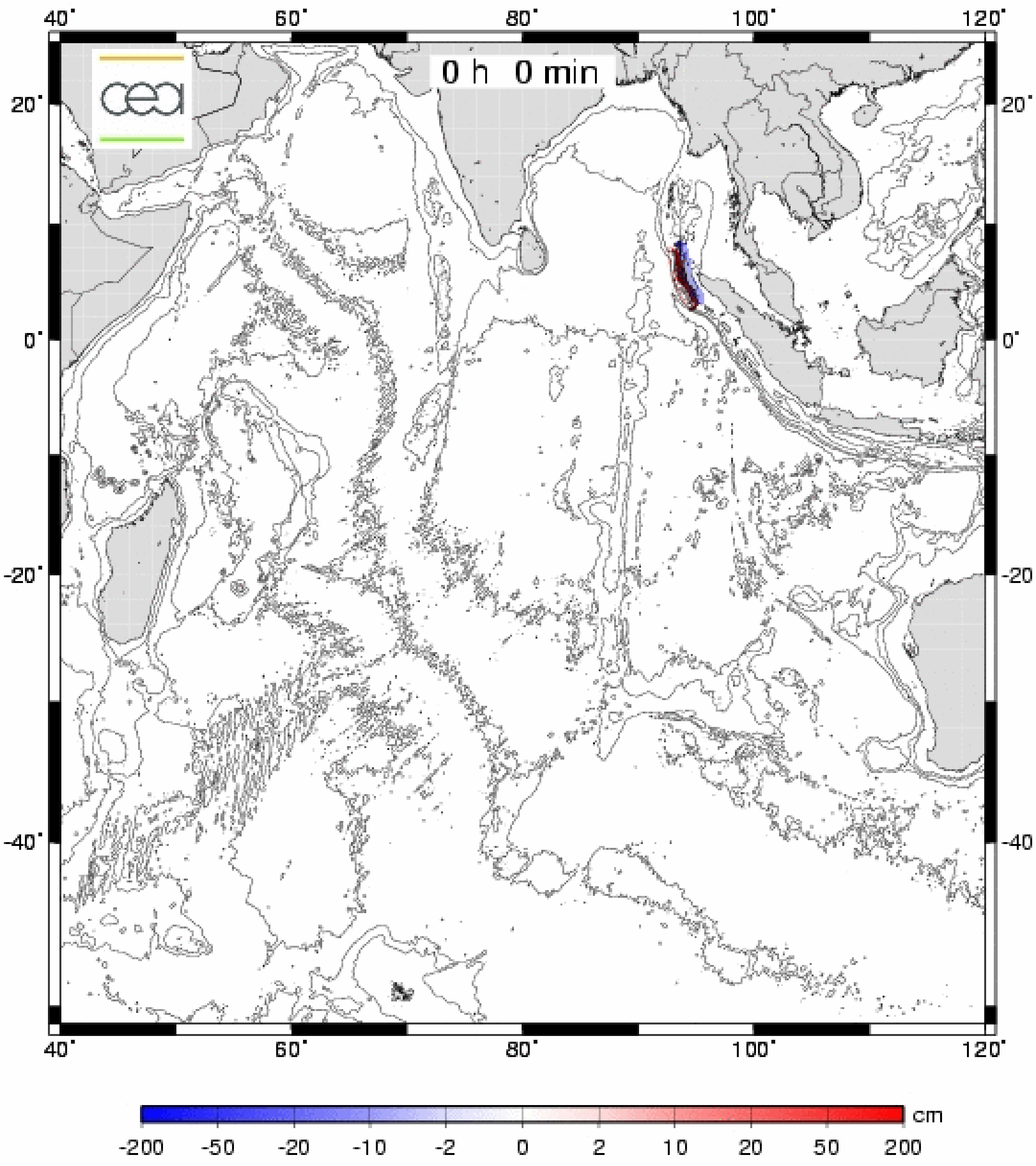
26 December 2004, 7h55 (WIB)
The Earth shakes

26 décembre 2004, 7h58 (WIB)



http://www.psychceu.com/tsunami/animation.sm.gif

Indian Ocean tsunami 2004



http://www-dase.cea.fr/actu/dossiers_scientifiques/2004-12-26/index_en.html

- Cette usine électrique flottante (3000 tonnes) s’est retrouvée à 6 km à l’intérieur des terres – Banda Aceh, Indonésie

Profondeur variable $h_0(x)$ $u(x) = \sqrt{g h_0(x)}$

Vitesse de propagation variable u(x)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - u^2(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\delta h\right) = 0 \quad (A)$$

$$\boxed{\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - \frac{\partial}{\partial x}\left(u^2(x)\frac{\partial}{\partial x}\delta h\right) = 0 \; (B)}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(u^2(x)\,\delta h\right) = 0 \quad (C)$$

Laquelle de ces équations est correcte?

Cela fait-il une différence sur la propagation du tsunami?

4.3 Mécanique Quantique - Schrödinger

- **4.3 Schrödinger**
  - **Corpusculaire, ondulatoire, probabiliste** $|\psi(\vec{x},t)|^2$

Particule libre:

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{p} &= \hbar\vec{k}\\ E &= \hbar\omega\end{aligned}}$$

$$\boxed{\psi(\vec{x},t) \sim \exp\left(i(kx-\omega t)\right)}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\nabla &\leftrightarrow ik\\ \frac{\partial}{\partial t} &\leftrightarrow -i\omega\end{aligned}}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{p} &\leftrightarrow -i\hbar\nabla\\ E &\leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\end{aligned}}$$

Particule dans un potentiel V(x):

$$\boxed{E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x})} \longrightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \overbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi}^{H(\psi)}}$$

- **Solution Eq. Schrödinger**

$$\psi(x,t) = \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}tH\right)}\psi(x,0)$$

  - Propagateur (opérateur d'évolution temporelle)
  - Propriété: unitarité (conservation de la probabilité)

- **4.3.1 Schéma numérique semi-implicite**
  - **Crank-Nicolson**
    - Discrétisation temporelle, pas de temps uniforme Δt

$$\psi(x,t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t\, H\right)\psi(x,t)$$

Appliquant l'opérateur $\exp\left(+\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}H\right)$ des 2 côtés,

Et développant au 1er ordre de exp

$$\boxed{\left(1+\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}H\right)\psi(x,t+\Delta t)=\left(1-\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}H\right)\psi(x,t)} \qquad (4.90)$$

Opérateur *A*. Partie implicite: il faut inverser l'opérateur

Opérateur *B*. Partie explicite: il faut appliquer l'opérateur

- **Discrétisation spatiale, maillage uniforme Δx**
- **Approximation par différences finies de l'opérateur différentiel spatial:**

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\bigg|_j=\frac{\psi_{j-1}-2\psi_j+\psi_{j+1}}{(\Delta x)^2}+\mathrm{O}\left(\Delta x^2\right)$$

Ainsi, l'opérateur Hamiltonien *H* peut s'écrire comme une matrice H. Appliquer l'opérateur *H* sur ψ revient à **multiplier la matrice H par le vecteur ψ** constitué des valeurs de ψ aux points de maillage x_j .

De même, les opérateurs *A* et *B* deviennent des matrices A et B.

- Schéma de Crank-Nicolson, ***semi-implicite***: $\boxed{A\,\Psi|_{t+\Delta t} = B\,\Psi|_t}$

$$\begin{pmatrix} dA_0 & cA_0 & & \\ aA_0 & \cdots & \cdots & \\ & \cdots & \cdots & cA_{N-2} \\ & & aA_{N-2} & dA_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \cdots \\ \cdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}_{t+\Delta t} = \begin{pmatrix} dB_0 & cB_0 & & \\ aB_0 & \cdots & \cdots & \\ & \cdots & \cdots & cB_{N-2} \\ & & aB_{N-2} & dB_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \cdots \\ \cdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}_{t} \quad (4.99)$$

Implicite. A Ψ=… . Résolution d'un système algébrique linéaire

Explicite. B Ψ . Multiplication matrice vecteur

- Le schéma de Crank-Nicolson a les bonnes propriétés suivantes:
  - Il conserve la probabilité totale

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

  - … et l'énergie

$$E(t) \equiv \langle H \rangle (t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) H\big(\psi(x,t)\big) dx = E(0), \ \forall t$$

… à la précision machine!

  - ***Preuve: au tableau***

- Schéma de Crank-Nicolson, ***semi-implicite***: $\boxed{A\,\Psi|_{t+\Delta t} = B\,\Psi|_t}$
- Conditions aux limites, cas d'un puits de potentiel infini dans $[x_L,x_R]$:

$$\psi(x_L,t)=0,\ \psi(x_R,t)=0,\ \forall t$$

$$\begin{pmatrix} \cancelto{1}{dA_0} & \cancelto{0}{cA_0} & & \\ \cancelto{0}{aA_0} & \cdots & \cdots & \\ & \cdots & \cdots & \cancelto{0}{cA_{N-2}} \\ & & \cancelto{0}{aA_{N-2}} & \cancelto{1}{dA_{N-1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \cdots \\ \cdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}_{t+\Delta t} = \begin{pmatrix} \cancelto{1}{dB_0} & \cancelto{0}{cB_0} & & \\ \cancelto{0}{aB_0} & \cdots & \cdots & \\ & \cdots & \cdots & \cancelto{0}{cB_{N-2}} \\ & & \cancelto{0}{aB_{N-2}} & \cancelto{1}{dB_{N-1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cancelto{0}{\psi_0} \\ \cdots \\ \cdots \\ \cancelto{0}{\psi_{N-1}} \end{pmatrix}_{t} \qquad (4.99)$$

Les éléments des matrices et des vecteurs «…» sont inchangés.

Le système «…» est en fait équivalent à celui résultant de la discrétisation sur le domaine $[x_L+\Delta x, x_R-\Delta x]$, dans lequel on aurait "oublié" d'appliquer les conditions aux limites.

Autrement dit, si vous «oubliez» d'appliquer les conditions aux limites sur le système (4.99), c'est comme si vous aviez en fait résolu le problème sur le domaine $[x_L-\Delta x, x_R+\Delta x]$ **avec** ses conditions aux limites.

Les observables de la mécanique quantique

Produit scalaire: $(\eta,\psi)=\int_{-\infty}^{+\infty}\eta^*(x,t)\psi(x,t)\,dx$

Opérateur adjoint: Ω^*, tel que $(\Omega\eta,\psi)=(\eta,\Omega^*\psi),\forall\eta,\forall\psi$

Opérateur hermitien: $\Omega^*=\Omega$

Opérateur unitaire: $\Omega^*\Omega=1$

$$\boxed{\text{Observable: décrit par un opérateur hermitien (= auto-adjoint)}}$$

Par exemple: $1, \vec{x},\ \vec{p}=-i\hbar\vec{\nabla},\ H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V$ sont des observables

Propriété: toutes les valeurs propres d' un opérateur hermitien sont réelles

- Interprétation probabiliste, moyennes et écart-types

$$\langle x\rangle(t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\,x\,\psi(x,t)\,dx \qquad \langle p\rangle(t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right)dx$$

$$\langle x^2\rangle(t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\,x^2\psi(x,t)\,dx \qquad \langle p^2\rangle(t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\left(-\frac{\hbar^2}{\cancel{2m}}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\right)dx$$

$$(\Delta x)^2(t)=\langle x^2\rangle(t)-\langle x\rangle^2(t) \qquad (\Delta p)^2(t)=\langle p^2\rangle(t)-\langle p\rangle^2(t)$$

$$E(t)\equiv\langle H\rangle(t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)H\big(\psi(x,t)\big)dx$$

- Propriétés

$$\langle p^2\rangle(t)=\int\psi^*(x,t)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\right)\mathrm{dx}$$

Probabilité totale conservée: $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\,\psi(x,t)\,dx=1,\ \forall t$

Valeur moyenne de l'énergie conservée: $E(t)=E(0),\ \forall t$

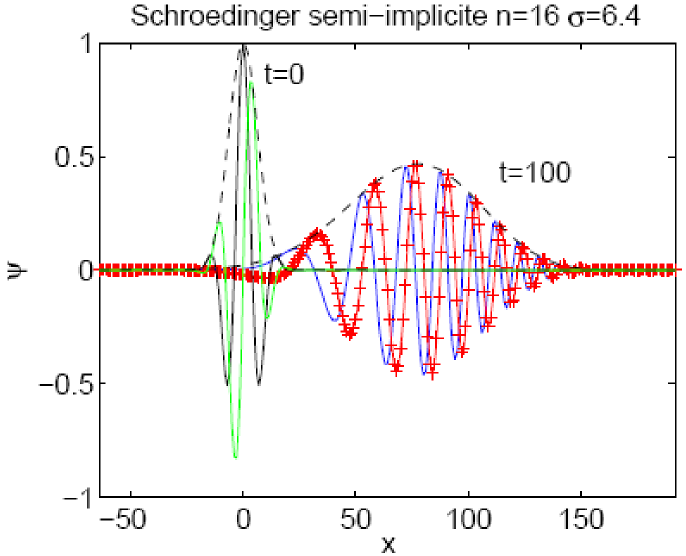
- Paquet d'onde Gaussien: on initialise l'état de la particule par une onde plane dont l'amplitude est modulée par une fonction Gaussienne

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

- Simulons la particule libre (V=0)

Exemples

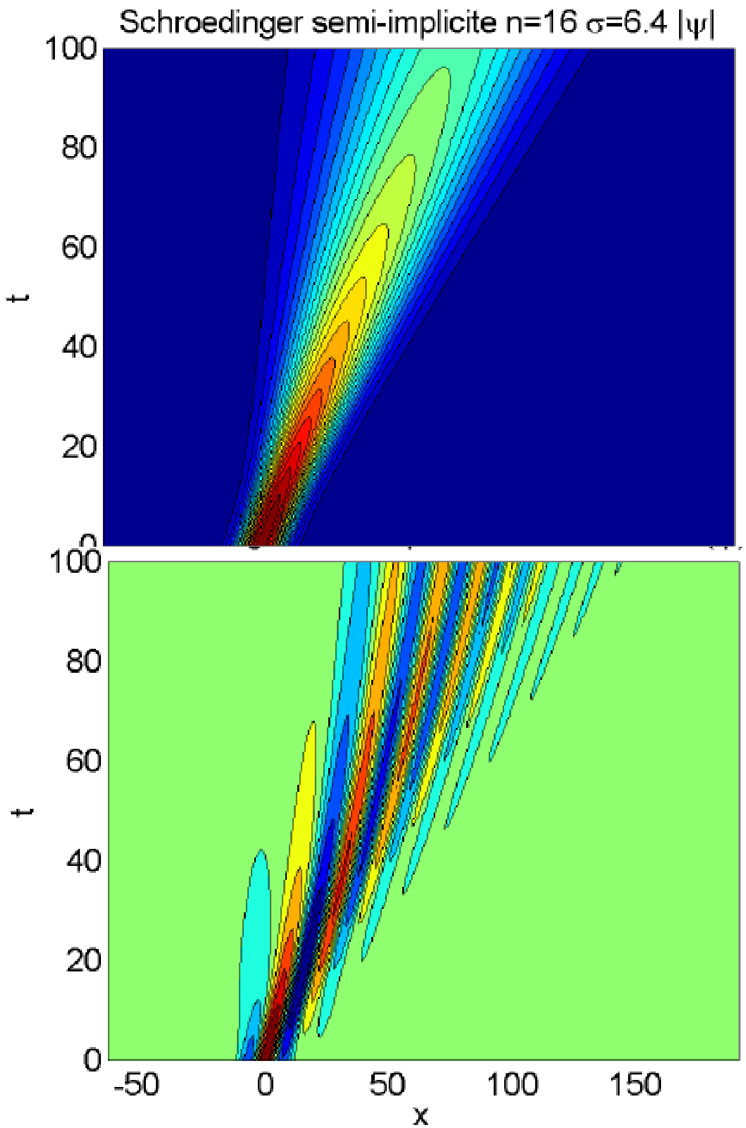
4.3.2 Particule libre



Etalement du paquet d'onde.

Effet de la **dispersion**, pas de diffusion!

(Etalement n'est pas $\sim \sqrt{t}$)



Quiz

Comment faire partir le paquet d'onde vers la gauche (onde rétrograde)?

On remarque que l'Eq. de Schrödinger est du premier ordre en dérivée temporelle ($\frac{\partial \psi}{\partial t}$), et non du 2e ordre comme les ondes classiques (d'Alembert), ($\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$)

Il n'y a donc qu' **une** seule condition initiale à imposer : $\psi(x, 0)$ connu $\Rightarrow \psi(x, t)$ connu $\forall t$

Dans le schéma numérique, on n'initialise ***pas*** $\psi(x, -\Delta t)$

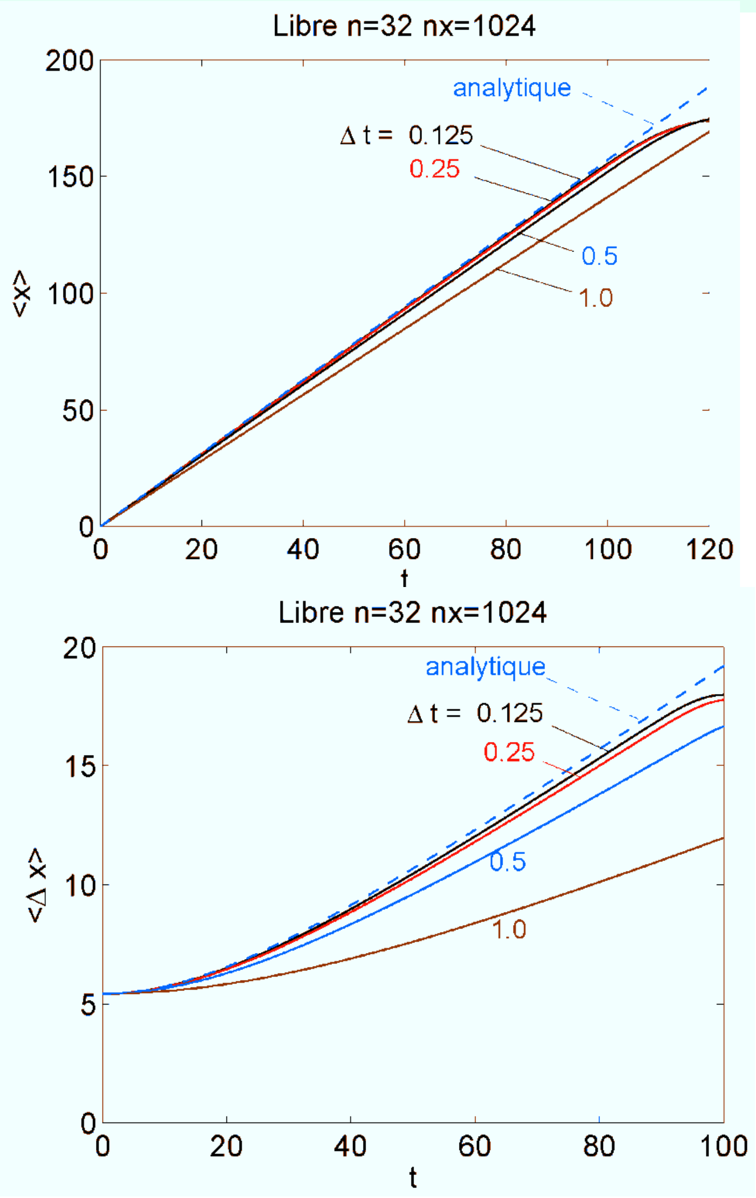
- ## Propagation

$$< x > (t) = \int \psi^*(x,t)\, x\, \psi(x,t)\, dx$$

$$< x > (t) =< x > (0) + \frac{\hbar k_0}{m} t$$

- ## Etalement

$$< \Delta x > (t) =< \Delta x > (0)\sqrt{1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2\sigma^2}}$$



- **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/