

# Rapport de Projet de méthodes mathématiques en mécanique quantique

Jincheng KE

3 décembre 2023

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Méthodologie</b>	<b>2</b>
1.1	Méthodologie de simulation . . . . .	2
1.2	Méthodologie de vérification . . . . .	2
1.3	Méthodologie de l'expérience sur les comportements avec des potentiels différents	3
<b>2</b>	<b>Résultats</b>	<b>4</b>
2.1	Simulation . . . . .	4
2.2	Expérience . . . . .	4
<b>3</b>	<b>Conclusion</b>	<b>9</b>

# Chapitre 1

## Méthodologie

### 1.1 Méthodologie de simulation

Nous utilisons la méthode pseudo-spectrale pour écrire un programme en Python afin de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger. L'implémentation de cette partie du code est disponible dans le fichier `Schema.py`.

### 1.2 Méthodologie de vérification

Tout d'abord, nous observons directement les résultats à travers des animations. Ensuite, en utilisant certaines conditions initiales spécifiques pour  $\psi_0$  et  $v$ , par exemple  $\psi_0 = \sin(x)$  et  $v=0$ , nous pouvons obtenir la solution exacte. En comparant visuellement les animations de la solution exacte et de la solution numérique, nous constatons qu'elles coïncident, ce qui valide la précision de notre méthode numérique. De plus, en calculant directement l'erreur entre la solution exacte et la solution numérique, nous observons que sous de bonnes conditions initiales, comme  $\psi_0 = \sin(x)$  et  $v=0$ , l'erreur entre la solution numérique et la solution exacte atteint l'erreur système de la machine après un certain nombre d'itérations, ce qui signifie que la solution numérique est égale à la solution exacte. Les détails de cette implémentation peuvent être trouvés dans les fonctions `test_of_solution_and_animation` et `test_for_verification_by_comparing_the_animation_with_the_exact_solution` du fichier `Test.py`.

Pour les cas généraux où  $\psi_0$  et  $v$  ne permettent pas d'obtenir une solution exacte, nous avons développé une méthode pour estimer l'erreur en utilisant la première erreur comme unité de référence. Cette "erreur estimée" converge à un taux similaire à l'erreur réelle. Nos observations montrent qu'avec l'augmentation de  $N_x$ , l'erreur converge exponentiellement, tandis qu'avec l'augmentation de  $N_t$ , elle converge polynomialement avec un ordre de 1. Ces résultats expérimentaux sont cohérents avec notre analyse théorique, renforçant ainsi la validité de notre méthode numérique. Les détails de l'analyse et de la visualisation des erreurs sont disponibles dans le fichier `Analysis.py`.

De plus, après de nombreux tests aléatoires sur différentes valeurs de  $N_x$  et  $N_t$ , nous avons déterminé que la complexité temporelle de notre algorithme est proportionnelle à  $N_t * N_x * \log(N_x)$ . Cette conclusion est également en accord avec notre analyse théorique. Les détails de cette implémentation peuvent être trouvés dans la fonction `test_of_time_complexity` du fichier `Test.py`.

## 1.3 Méthodologie de l'expérience sur les comportements avec des potentiels différents

Notre recherche s'est d'abord concentrée sur l'étude du paquet d'onde en l'absence de potentiel, ce qui nous a permis d'établir une base de référence pour nos expériences ultérieures. Nous avons ensuite progressé vers l'analyse sous un potentiel linéaire, i.e.  $V(x)=k \cdot x$ . Cette étape a été cruciale pour comprendre l'impact d'un potentiel simple et direct sur le comportement du paquet d'onde.

L'aspect le plus challengeant de notre étude a été l'examen des potentiels de barrière variables. En raison de la nature non continue de certaines fonctions de potentiel, nous avons rencontré des difficultés de convergence avec nos méthodes numériques. Pour surmonter ce problème, nous avons approximé les sections discontinues des fonctions de potentiel par des fonctions linéaires par morceaux, ce qui a amélioré la stabilité et la fiabilité de nos simulations numériques.

# Chapitre 2

## Résultats

### 2.1 Simulation

Résultats de la simulation.

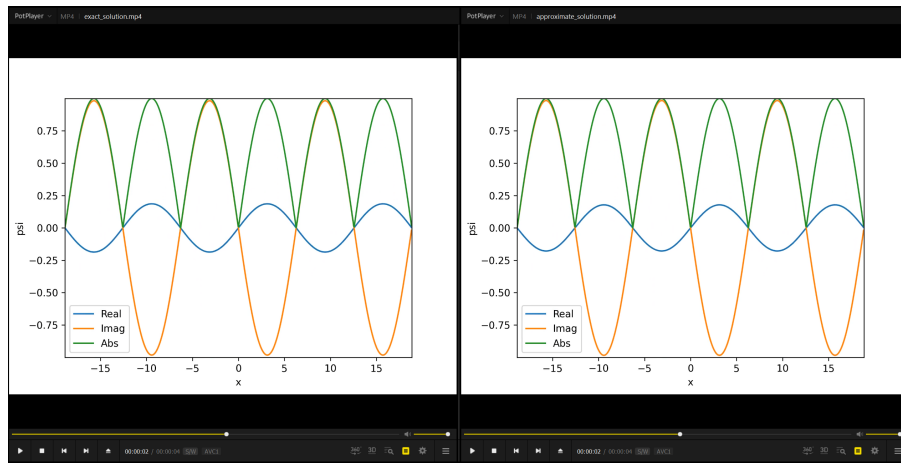


FIGURE 2.1 – Animations de sol exacte et de sol numérique.

### 2.2 Expérience

Résultats de l'expérience.

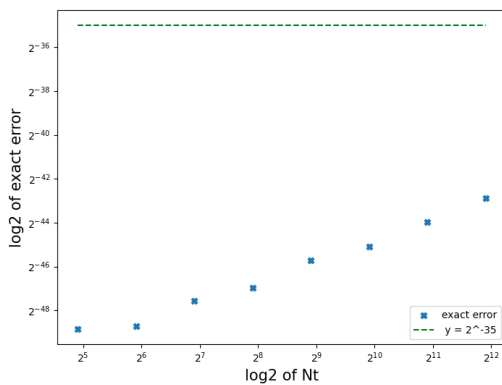


FIGURE 2.2 – Convergence par apport à  $N_t$ .

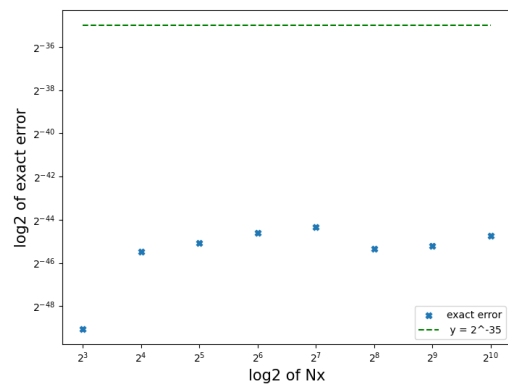


FIGURE 2.3 – Convergence par apport à  $N_x$ .

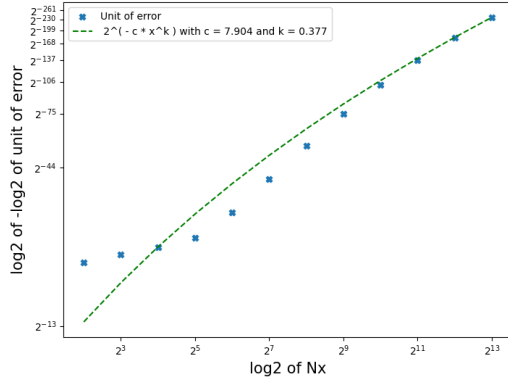


FIGURE 2.4 – L'estimation des erreurs par ap-  
port à  $N_x$  en échelle exponentielle.

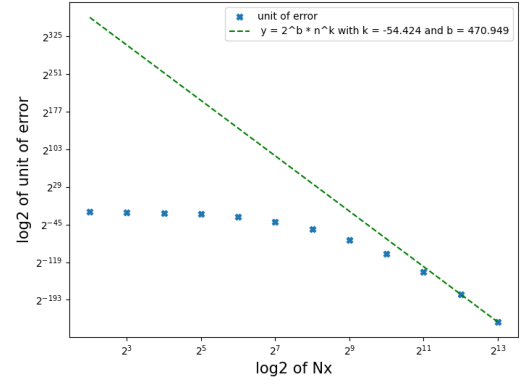


FIGURE 2.5 – L'estimation des erreurs par ap-  
port à  $N_x$  en échelle polynomiale.

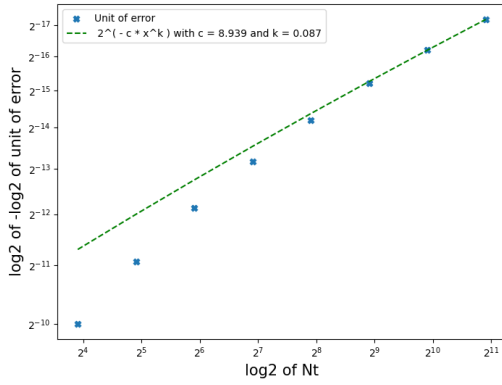


FIGURE 2.6 – L'estimation des erreurs par ap-  
port à  $N_t$  en échelle exponentielle.

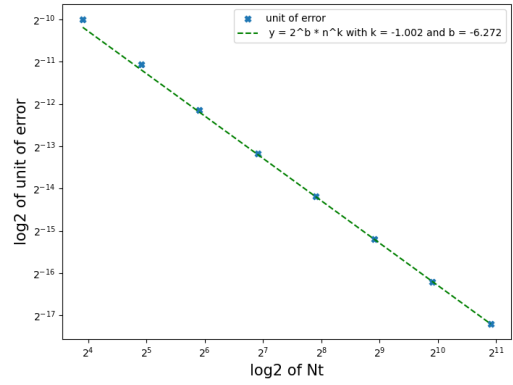


FIGURE 2.7 – L'estimation des erreurs par ap-  
port à  $N_t$  en échelle polynomiale.

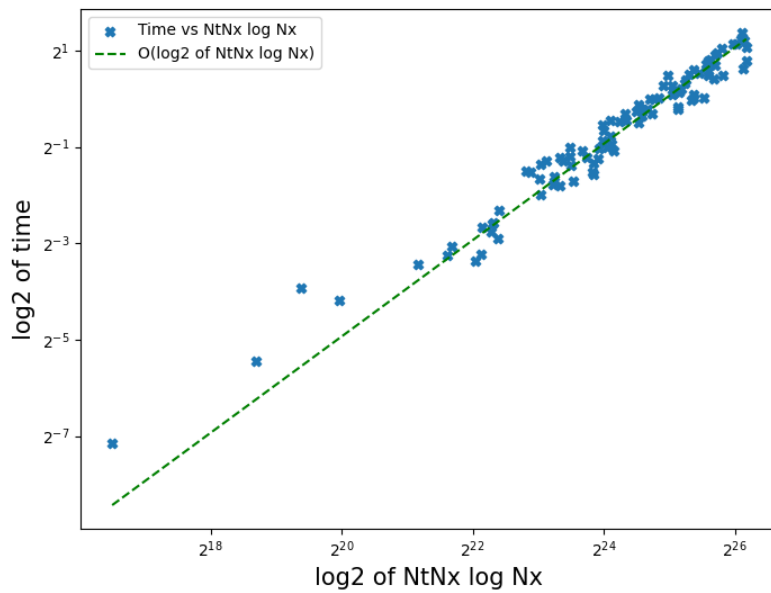


FIGURE 2.8 – Complexité en temps.

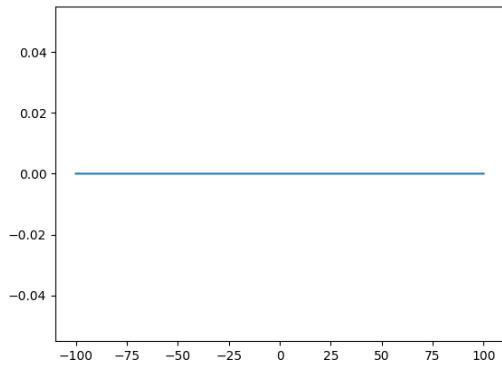


FIGURE 2.9 – Potentiel cas 0

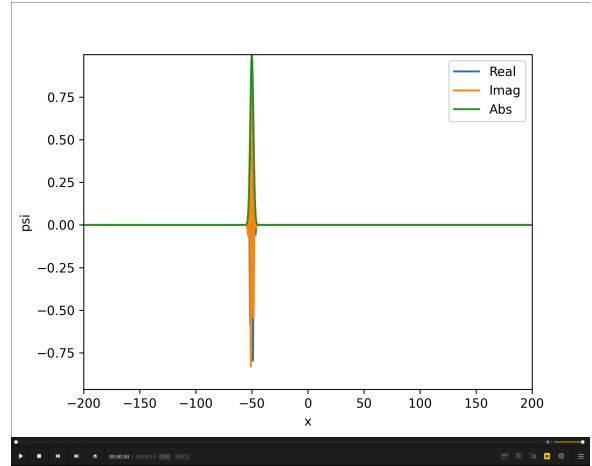


FIGURE 2.10 – Condition initiale  $\psi_0$

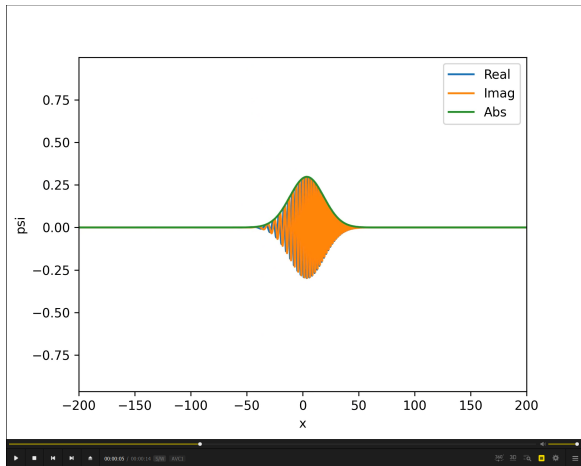


FIGURE 2.11 –  $t = 5$

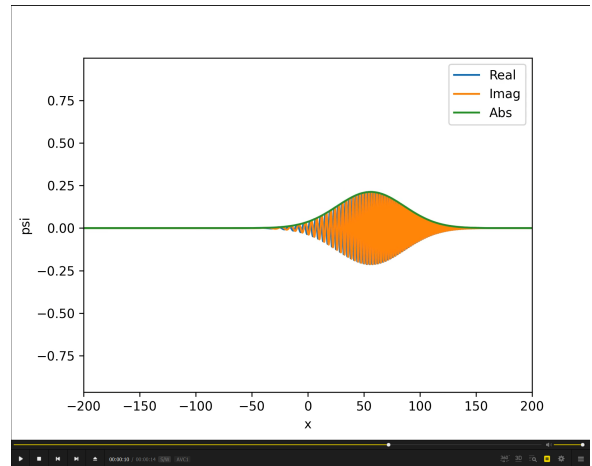


FIGURE 2.12 –  $t = 10$

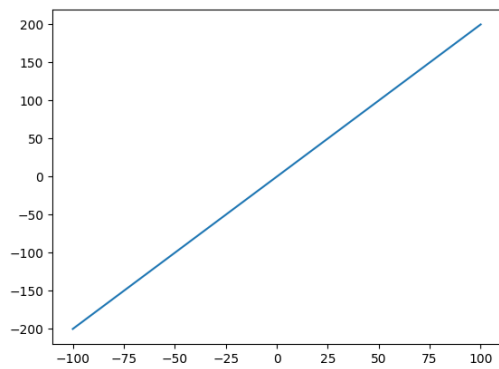


FIGURE 2.13 – Potentiel cas 1

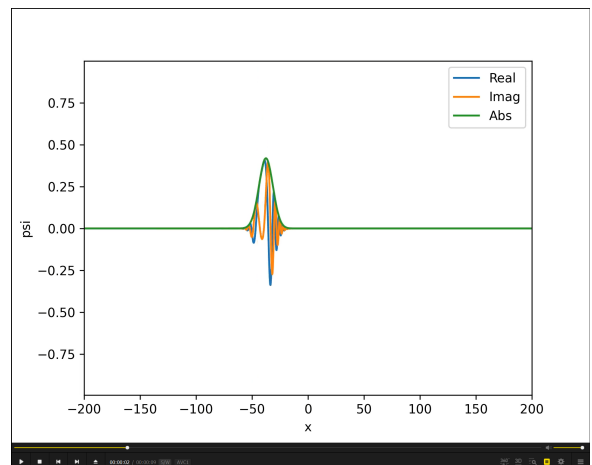


FIGURE 2.14 –  $t = 2$

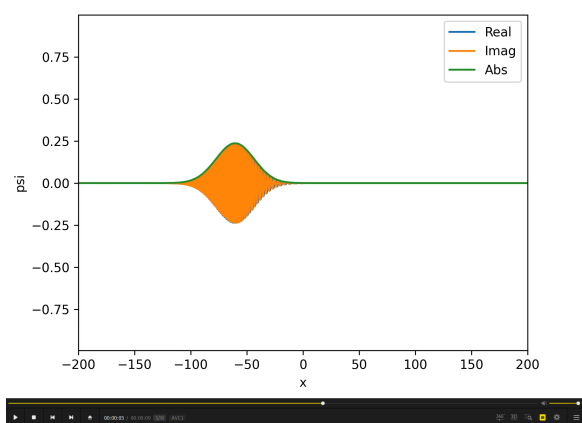


FIGURE 2.15 –  $t = 5$

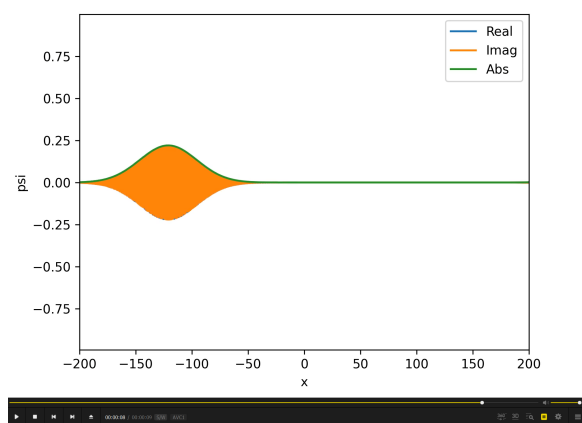


FIGURE 2.16 –  $t = 8$

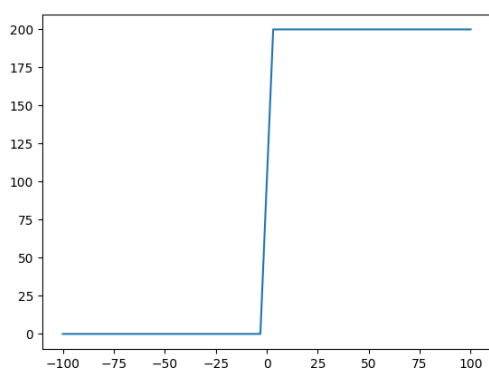


FIGURE 2.17 – Potentiel cas 2

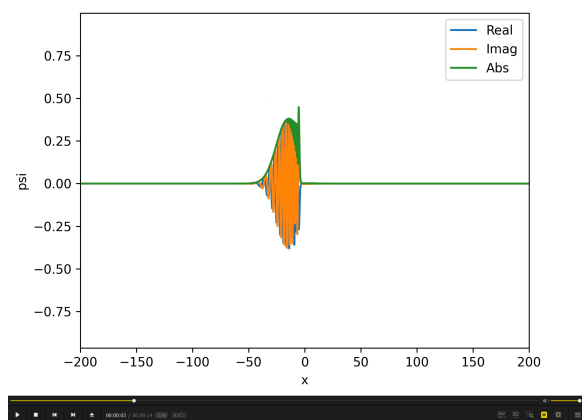


FIGURE 2.18 –  $t = 3$

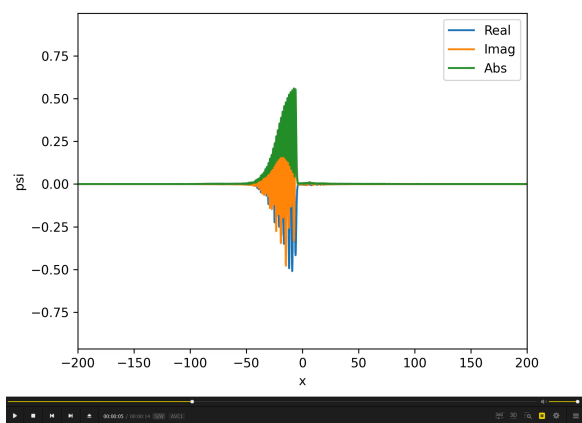


FIGURE 2.19 –  $t = 5$

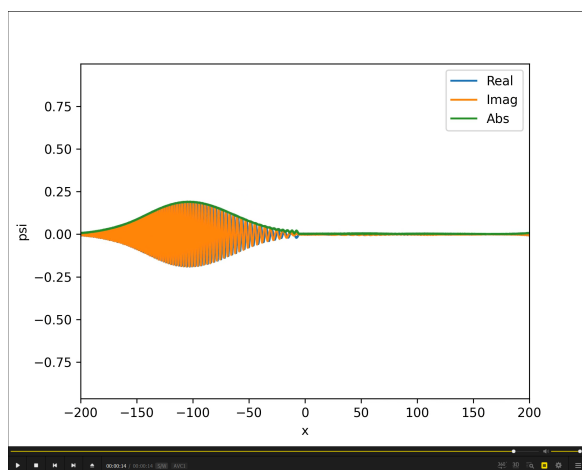


FIGURE 2.20 –  $t = 14$



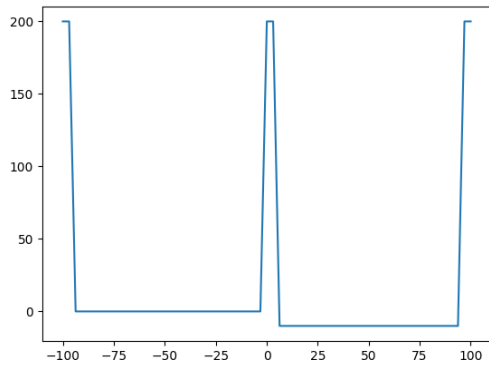


FIGURE 2.21 – Potentiel cas 3

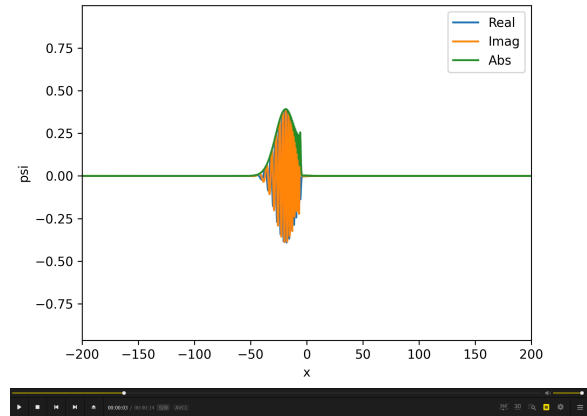


FIGURE 2.22 –  $t = 3$

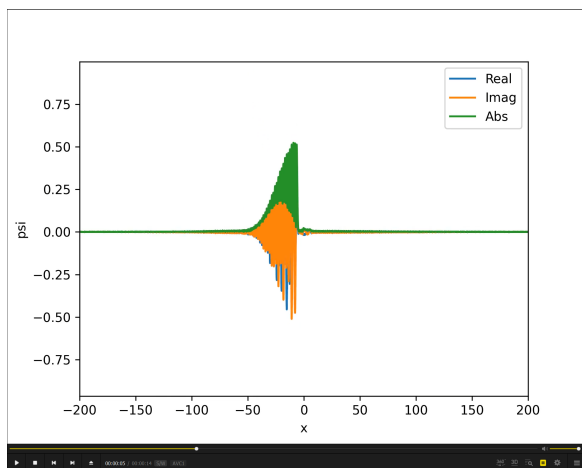


FIGURE 2.23 –  $t = 5$

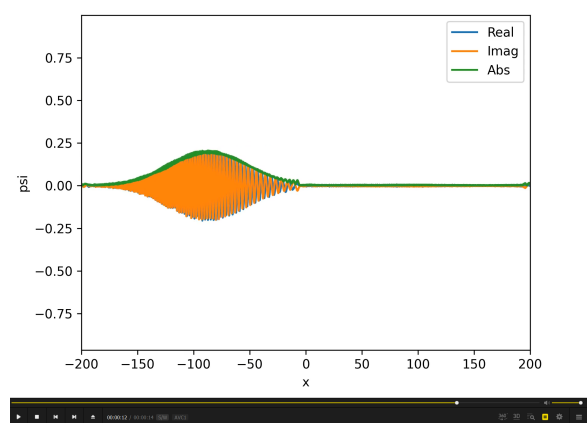


FIGURE 2.24 –  $t = 12$

# Chapitre 3

## Conclusion

Au cours de ce projet, nous avons réussi à mettre en œuvre le code de simulation et à valider la précision et l'efficacité de notre méthode par des expérimentations. Pour des conditions initiales spécifiques, nous avons pu atteindre la solution exacte en un nombre fini d'étapes. Pour des cas plus généraux, nos observations montrent une convergence exponentielle par rapport à la taille de pas spatial  $Nx$  et une convergence polynomiale d'ordre 1 par rapport à la taille de pas temporel  $Nt$ . Ces résultats expérimentaux sont en accord avec nos prédictions théoriques. De plus, nos tests montrent que la complexité temporelle de notre méthode est en  $O(Nt \times Nx \times \log(Nx))$ , ce qui est également conforme à nos attentes théoriques.

Au cours de ce projet, nous avons approfondi notre compréhension de l'impact des différents potentiels sur le comportement des paquets d'ondes. Dans notre expérience de contrôle sans potentiel, nous avons observé que, en l'absence de potentiel, le paquet d'onde se déplace en mouvement rectiligne uniforme, avec une augmentation progressive de sa variance au fil du temps.

Sous l'influence d'un potentiel linéaire, les résultats expérimentaux ont montré des comportements analogues à ceux de la mécanique classique. Le paquet d'onde se comportait comme un objet se déplaçant sur une pente : ralentissant en montant la pente, s'arrêtant brièvement, puis accélérant dans la direction opposée.

L'expérimentation avec des potentiels de barrière a révélé des comportements similaires à des collisions élastiques en mécanique classique. Avant de rencontrer la barrière de potentiel, le paquet d'onde se déplaçait à vitesse constante. À l'impact avec la barrière, sa vitesse s'inversait, poursuivant ensuite son mouvement en ligne droite à la même vitesse mais en sens opposé.

Finalement, lors de l'étude de potentiels de barrière plus complexes, notre objectif était d'observer l'Effet tunnel. Cependant, il se peut que nous n'ayons pas choisi la fonction de potentiel appropriée, car nous n'avons pas observé d'effet de tunneling. Au lieu de cela, le comportement du paquet d'onde était similaire à celui observé dans les expériences précédentes, ressemblant à une collision élastique.

Ces observations enrichissent notre compréhension des interactions entre les paquets d'ondes et différents potentiels, et mettent en lumière les similitudes et les différences entre la mécanique quantique et classique. Bien que nous n'ayons pas réussi à observer l'Effet tunnel, ces expériences ont fourni des informations précieuses sur le comportement des ondes quantiques dans divers scénarios de potentiel.