Physique Numérique I-II semaine 24

Rappel: Ondes - 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.

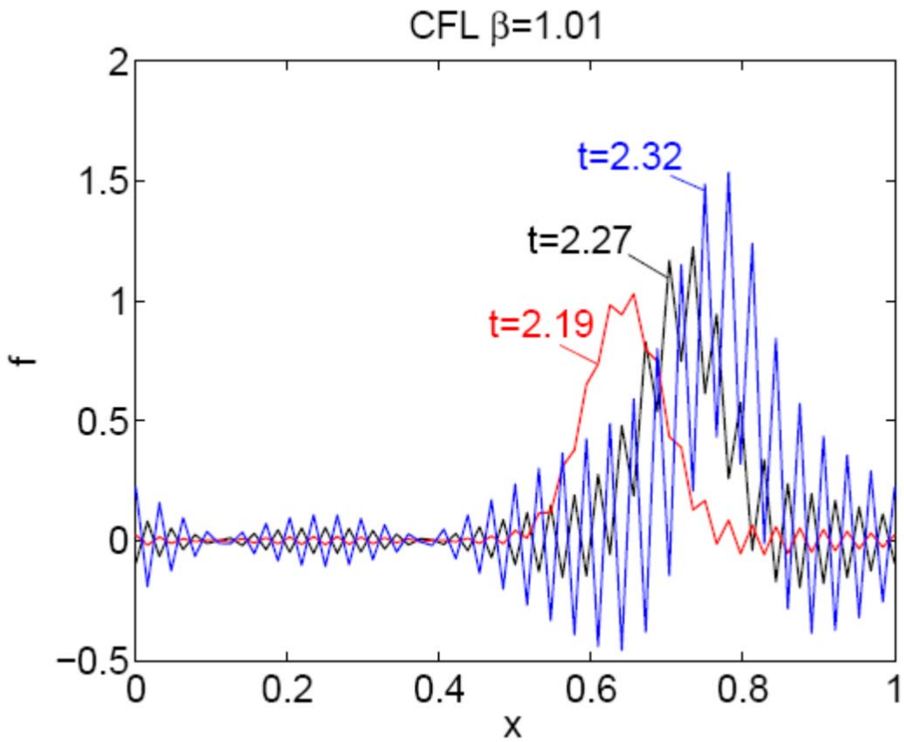
- Principe de superposition: la combinaison linéaire de 2 modes propres est également solution du système homogène.

Rappel: Ondes – instabilité numérique

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

Condition de stabilité CFL $\boxed{0 \le \beta^2 \le 1}$

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



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

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

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - u^2(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\delta h) = 0 \text{ (I)} \qquad A(x) \propto (h_0(x))^{1/4}$$

$$\boxed{\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - \frac{\partial}{\partial x}\left(u^2(x)\frac{\partial}{\partial x}\delta h\right) = 0 \text{ (II)} \qquad A(x) \propto \frac{1}{(h_0(x))^{1/4}}}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta h - \frac{\partial^2}{\partial x^2}(u^2(x)\,\delta h) = 0 \text{ (III)} \qquad A(x) \propto \frac{1}{(h_0(x))^{3/4}}$$

Ondes - u(x) - Conclusions

- La simulation numérique et la méthode WKB permettent de mettre en évidence que:
  - la vitesse de propagation et la longueur d'onde diminuent quand la vague se rapproche des côtes

$$u(x) = \sqrt{gh(x)}$$

$$\lambda(x) = 2\pi / k(x) = 2\pi\, u(x) / \omega = 2\pi \sqrt{gh(x)} / \omega$$

  - l'amplitude de la vague augmente quand la vague se rapproche des côtes

$$A(x) = \frac{A_0}{(h(x))^{1/4}}$$

Remarques

- Les équations ont été dérivées sous trois approximations:
  - Longueur d'onde λ >> profondeur h_o
  - Petites perturbations $\delta h \ll h_o$ ➔ linéarisation
  - Cas unidimensionnel
- Lorsque la vague se rapproche des côtes, la 2e hypothèse n'est plus vérifiée. Des phénomènes non linéaires apparaissent, tels le « wave breaking » et les solitons. Voir les équations de Burger et de Korteweg – de Vries.
- D'autres phénomènes peuvent encore modifier (et malheureusement augmenter parfois) l'amplitude de la vague, notamment la focalisation lorsque le front d'onde n'est pas 1D.

Physique Numérique I-II semaine 24

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

Particule libre:

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

$$\psi(x,t) \sim \exp(i(kx-\omega t))$$

$$\boxed{\begin{aligned}\nabla &\Leftrightarrow i\vec{k}\\ \frac{\partial}{\partial t} &\Leftrightarrow -i\omega\end{aligned}}$$

Particule dans un potentiel V(x):

$$\boxed{\vec{p} \rightarrow -i\hbar\nabla}$$

$$\boxed{E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}}$$

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

- **Solution Eq. Schrödinger**

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

  - **propagateur (opérateur évolution temporelle)**
  - **unitarité (conservation de la probabilité)**

- **4.3.1 Schéma numérique semi-implicite**
  - **Crank-Nicolson**
    - **Discrétisation temporelle**

$$\boxed{\left(1 + \frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2} H\right) \psi(x, t+\Delta t) = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2} H\right) \psi(x,t)} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \qquad (4.77)$$

    - **Discrétisation spatiale: différences finies**

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

- On obtient le schéma de Crank-Nicolson, semi-implicite:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} dA_0 & cA_0 & & \\ aA_0 & \dots & \dots & \\ & \dots & \dots & cA_{N-2} \\ & & aA_{N-2} & dA_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \dots \\ \dots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}_{t+\Delta t}}_{\text{Implicite. Résolution d'un système algébrique linéaire}} = \underbrace{\begin{pmatrix} dB_0 & cB_0 & & \\ aB_0 & \dots & \dots & \\ & \dots & \dots & cB_{N-2} \\ & & aB_{N-2} & dB_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \dots \\ \dots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}_{t}}_{\text{Explicite. Multiplication matrice x vecteur}} \quad (4.90)$$

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

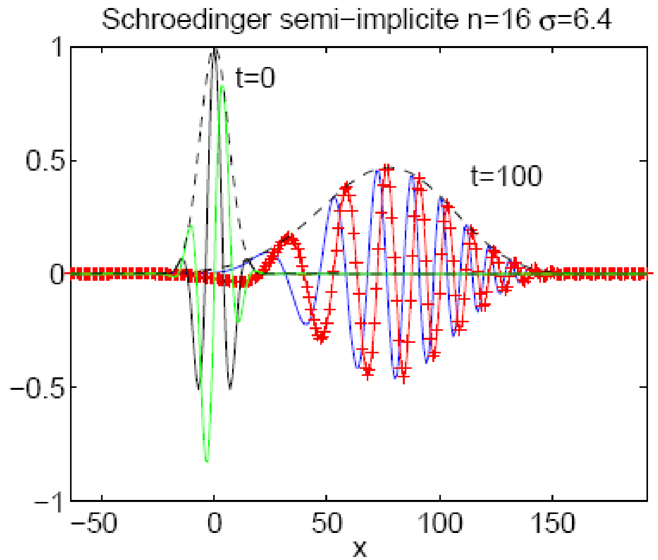
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi(x,t)\right|^2 dx = 1,\ \forall t$$

  - Il conserve 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!

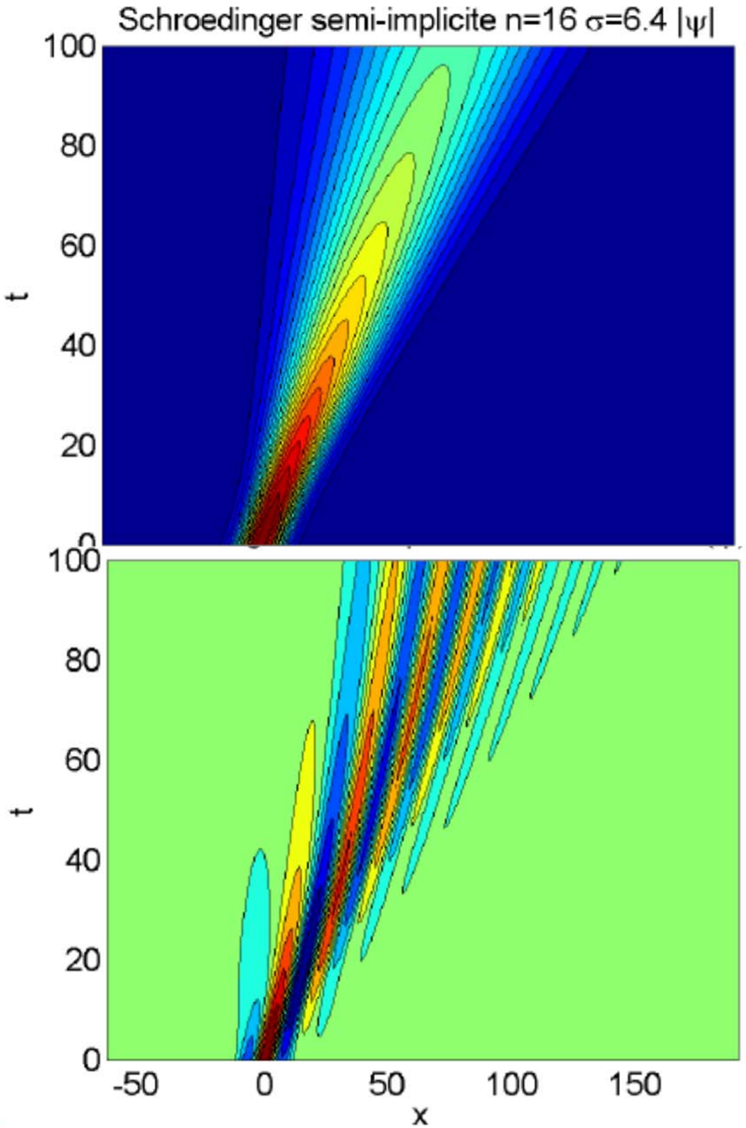
- Exemples
  - 4.3.2 Particule libre



Etalement du paquet d'onde.

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

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



- **Condition initiale:**
  - **Paquet d'onde Gaussien**

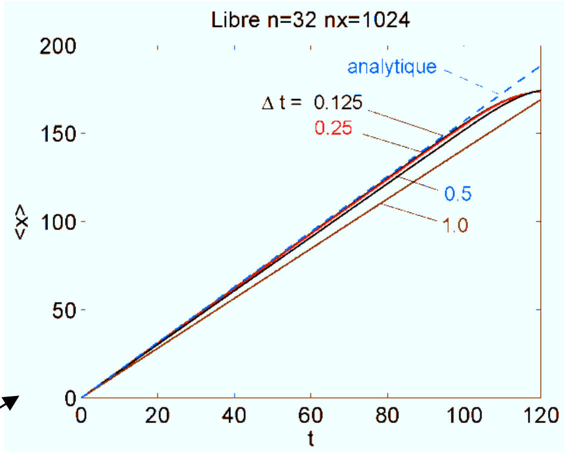
$$\psi(x,0) = C e^{ik_0 x} e^{-(x-x_0)^2/(2\sigma^2)}$$

- **Position moyenne**

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

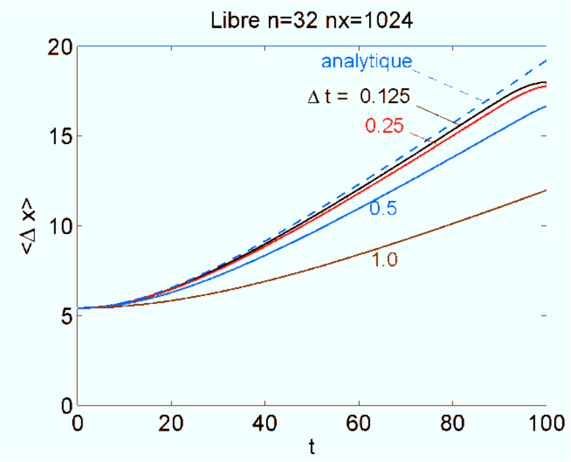
- **Propagation**

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



- **Etalement**

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



- **On définit les quantités «moyennes» , ou espérances mathématiques:**

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

$$< x^2 > (t) = \int \psi^*(x,t)\, x^2 \psi(x,t)\, dx = \langle \psi | x^2 \psi \rangle$$

$$< p > (t) = \int \psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} \right) dx = \langle \psi | -i\hbar \partial_x \psi \rangle$$

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

$$E(t) \equiv < H > (t) = \int \psi^*(x,t)\, H \big(\psi(x,t)\big) dx = \langle \psi | H \psi \rangle$$

- **On définit les «incertitudes», ou écarts-types**

$$\langle \Delta x \rangle (t) = \sqrt{\langle x^2 \rangle (t) - (< x > (t))^2}$$

$$\langle \Delta p \rangle (t) = \sqrt{\langle p^2 \rangle (t) - (< p > (t))^2}$$

- **Principe d'incertitude de Heisenberg**

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

- **Peut se comprendre à l'aide de la transformée de Fourier et de la relation** $p = \hbar k$