

LPHY2371 : Projet de simulation numérique

Tytgat Alexandre, Weber Valentin

13 janvier 2018

Table des matières

1	Introduction générale	5
2	Les méthodes spectrales	6
2.1	Introduction	6
2.2	Généralités	6
2.3	Calcul du résidu	6
2.4	Méthode de Tau	10
2.5	Méthode de Galerkin	11
2.6	Méthode de Collocation	14
2.7	Méthode de différence finie	16
2.8	Comparaison des méthodes	17
3	Excitation électromagnétique d'une particule chargée	20
3.1	Introduction	20
3.2	L'équation de Schrödinger indépendante du temps	20
3.3	Équation de Schrödinger dépendante du temps	23
3.4	Résultats	25
3.4.1	Quelques états liés	25
3.4.2	Oscillations de Rabi	29
4	Conclusion	33

1 Introduction générale

Dans ce travail, nous allons nous familiariser avec différentes méthodes de résolution d'équations différentielles. Les équations différentielles sont omniprésentes en physique, il est donc primordial de savoir comment les aborder au mieux. Dans un premier temps, nous nous attaquerons à une simple EDO sans signification physique. Nous nous servirons des méthodes spectrales pour trouver des solutions numériques et nous comparerons ces dernières avec une solution obtenue par un schéma en différence finie. Ensuite, nous étudierons un problème plus intéressant pour son aspect physique. Nous montrerons comment résoudre l'équation de Schrödinger (à une dimension) pour une particule coincée dans un puits de potentiel et excitée par une impulsion électromagnétique.

2 Les méthodes spectrales

2.1 Introduction

Il existe 3 grandes classes de méthodes pour résoudre numériquement les équations différentielles : les méthodes de différences finies, les méthodes d'éléments finis, et les méthodes spectrales. Dans cette partie, nous allons illustrer cette dernière classe de méthodes à travers un exemple concret. Nous présenterons les résultats obtenus pour 3 méthodes :

- La méthode de Tau
- La méthode de Galerkin
- La méthode de Collocation

Ensuite, nous résoudrons l'équation avec une méthode de différence finie afin de pouvoir comparer l'efficacité des différentes méthodes et l'erreur associée à chacune d'entre elles.

2.2 Généralités

Pour commencer, voici l'équation que l'on se propose de résoudre :

$$u_{xx} + u_x - 2u + 2 = 0 \quad (1)$$

La solution est définie sur l'intervalle $[-1, 1]$ et on pose comme conditions aux bords $u(-1) = u(1) = 0$.

Cette équation possède une solution analytique de la forme suivante,

$$u(x) = 1 - \frac{\sinh(2)e^x + \sinh(1)e^{-2x}}{\sinh(3)}$$

Le principe des méthodes spectrales est d'approximer la solution par un développement tronqué dans une base appropriée. Nous allons choisir les polynômes de Tchebychev $T_k(x)$ comme base,

$$v(x) = \sum_{k=0}^N a_k T_k(x)$$

Ce choix de fonction comme base est motivé par le fait qu'ils sont définis sur l'intervalle $[-1, 1]$ et qu'ils jouissent de bonnes propriétés qui simplifieront nos calculs.

2.3 Calcul du résidu

Avant d'aller plus loin, rappelons la forme et quelques propriétés des polynômes de Tchebychev [1],

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)) \quad (2)$$

$$T_n(\pm 1) = (\pm 1)^n \quad (3)$$

$$2T_n(x) = \frac{T'_{n+1}(x)}{n+1} - \frac{T'_{n-1}(x)}{n-1}, n \geq 2 \quad (4)$$

$$\int_{-1}^1 T_n(x)T_m(x)(1-x^2)^{-\frac{1}{2}}dx = \frac{\pi}{2}c_n\delta_{nm} \quad (5)$$

avec $c_0 = 2$ et $c_n = 1$ pour tout $n > 0$.

Étant donné que notre solution n'est pas exacte, nous aurons un résidu si l'on injecte notre solution approchée dans l'équation différentielle (1),

$$R(x) = v_{xx} + v_x - 2v + 2 = \sum_{k=0}^N \tilde{A}_k T_k(x) \quad (6)$$

Le résidu peut en effet être écrit sous forme de série de polynômes de Tchebychev en considérant la relation de récurrence (4).

Notre but dans cette section est de trouver une relation entre les coefficients du résidu \tilde{A}_k et ceux de la solution approchée a_k car les méthodes qui seront utilisées dans la suite nécessitent une expression du résidu sous forme de série de coefficients a_k . Pour y arriver, nous allons développer chaque terme de (1) en série de polynome de Tchebychev.

Commençons par la dérivée première,

$$v'(x) = \sum_{k=0}^N A_k T_k(x) = \sum_{k=0}^N a_k T'_k(x) \quad (7)$$

La relation (4) nous donne,

$$T'_n = 2nT_{n-1} + \frac{n}{n-2}T_{n-2}$$

que l'on développe,

$$\begin{aligned} T'_n &= 2nT_{n-1} + 2nT_{n-3} + \frac{n}{n-4}T'_{n-4} \\ &= 2nT_{n-1} + 2nT_{n-3} + 2nT_{n-5} + \frac{n}{n-6}T'_{n-6} \\ &= \begin{cases} 2nT_{n-1} + 2nT_{n-3} + \dots + 2nT_4 + 2nT_2 + nT_0, & \text{pour } n \text{ impair.} \\ 2nT_{n-1} + 2nT_{n-3} + \dots + 2nT_5 + 2nT_3 + 2nT_1, & \text{pour } n \text{ pair.} \end{cases} \\ &= \begin{cases} 2n \left(\frac{T_0}{2} + \sum_{k=1}^{\frac{n-1}{2}} T_{2k} \right), & \text{pour } n \text{ impair.} \\ 2n \left(\sum_{k=0}^{\frac{n}{2}-1} T_{2k+1} \right), & \text{pour } n \text{ pair.} \end{cases} \end{aligned}$$

En développant (7) pour $N = 6$ on obtient,

$$\begin{aligned} &A_0T_0 + A_1T_1 + A_2T_2 + A_3T_3 + A_4T_4 + A_5T_5 + A_6T_6 \\ &= (a_1 + 3a_3 + 5a_5)T_0 \\ &+ (4a_2 + 8a_4 + 12a_6)T_1 \\ &+ (6a_3 + 10a_5)T_2 \\ &+ (8a_4 + 12a_6)T_3 \\ &+ 10a_5T_4 \\ &+ 12a_6T_5 \end{aligned}$$

On trouve donc les expressions suivantes pour les 5 premiers coefficients,

$$\begin{aligned}
A_0 &= \begin{cases} a_1 + 3a_3 + 5a_5 + \dots + Na_N, & \text{pour } N \text{ impair.} \\ a_1 + 3a_3 + 5a_5 + \dots + (N-1)a_{N-1}, & \text{pour } N \text{ pair.} \end{cases} \\
A_1 &= \begin{cases} 4a_2 + 8a_4 + 12a_6 + \dots + 2Na_N, & \text{pour } N \text{ pair.} \\ 4a_2 + 8a_4 + 12a_6 + \dots + 2(N-1)a_{N-1}, & \text{pour } N \text{ impair.} \end{cases} \\
A_2 &= \begin{cases} 6a_3 + 10a_5 + 14a_7 + \dots + 2Na_N, & \text{pour } N \text{ impair.} \\ 6a_3 + 10a_5 + 14a_7 + \dots + 2(N-1)a_{N-1}, & \text{pour } N \text{ pair.} \end{cases} \\
A_3 &= \begin{cases} 8a_4 + 12a_6 + 16a_8 + \dots + 2Na_N, & \text{pour } N \text{ pair.} \\ 8a_4 + 12a_6 + 16a_8 + \dots + 2(N-1)a_{N-1}, & \text{pour } N \text{ impair.} \end{cases} \\
A_4 &= \begin{cases} 10a_5 + 14a_7 + 18a_9 + \dots + 2Na_N, & \text{pour } N \text{ impair.} \\ 10a_5 + 14a_7 + 18a_9 + \dots + 2(N-1)a_{N-1}, & \text{pour } N \text{ pair.} \end{cases}
\end{aligned}$$

On peut généraliser les expressions des A_k de la façon suivante,

— **Cas N pair et k impair**

$$A_k = \sum_{n=\frac{k+1}{2}}^{\frac{N}{2}} 4na_{2n}$$

— **Cas N pair et k pair**

$$A_k = \sum_{n=\frac{k}{2}}^{\frac{N}{2}-1} 2(2n+1)a_{2n+1}$$

— **Cas N impair et k impair**

$$A_k = \sum_{n=\frac{k+1}{2}}^{\frac{N-1}{2}} 4na_{2n}$$

— **Cas N impair et k pair**

$$A_k = \sum_{n=\frac{k}{2}}^{\frac{N-1}{2}} 2(2n+1)a_{2n+1}$$

On peut réécrire ce système d'équation sous forme matricielle,

$$\vec{A} = D\vec{a} \tag{8}$$

avec

$$d_{ij} = \begin{cases} j, & \text{si } i = 1 \text{ et si } j \text{ est impair} \\ 2j, & \text{si } i > 1, \text{ et si } j > i \text{ et si } j \text{ et } i \text{ sont soit pair/impair soit impair/pair} \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$$

Voilà à quoi ressemble la matrice de dérivation pour $N=10$,

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 & 0 & 5 & 0 & 7 & 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 8 & 0 & 12 & 0 & 16 & 0 & 20 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 10 & 0 & 14 & 0 & 18 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 12 & 0 & 16 & 0 & 20 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 14 & 0 & 18 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 & 0 & 16 & 0 & 20 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 14 & 0 & 18 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 16 & 0 & 20 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 18 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 20 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Occupons-nous maintenant de la dérivée seconde. En fait, on la trouve facilement en connaissant la matrice de dérivation du premier ordre. En effet, en utilisant (7) et (8) on trouve,

$$\begin{aligned} v''(x) &= (v'(x))' \\ &= \left(\sum_{k=0}^N A_k T_k(x) \right)' \\ &= \sum_{k=0}^N A_k^{(1)} T_k(x) \end{aligned}$$

Donc on obtient,

$$\vec{A}^{(1)} = D\vec{A} = DD\vec{a}$$

Finalement, réécrivons (6) avec les résultats que nous venons d'obtenir et en utilisant $T_0 = 1$,

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N \tilde{A}_k T_k(x) &= \sum_{k=0}^N (A_k^{(1)} + A_k - 2a_k) T_k(x) + 2T_0 \\ &= \sum_{k=0}^N ((D^2\vec{a})_k + (Da)_k - 2a_k) T_k(x) + 2T_0 \end{aligned} \tag{9}$$

Ce qui nous donne la relation que l'on cherchait,

$$\vec{A} = (D^2 + D - 2I)\vec{a} + \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

Ce résultat nous sera utile dans la suite !

2.4 Méthode de Tau

La première méthode spectrale que nous allons utiliser pour résoudre ce problème est la méthode de Tau. Comme notre but est de trouver les coefficients a_k qui approximent le mieux la solution exacte, cela revient à minimiser le résidu. Une manière d'y parvenir est de trouver les coefficients a_k tels que la moyenne du résidu soit nulle,

$$\int_{-1}^1 \frac{R(x)T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = 0$$

pour $n = 2, 3, \dots, N$. On va utiliser $R(x) = \sum_{k=0}^N \tilde{A}_k T_k(x)$ et la relation d'orthogonalité (5) pour transformer ce système de $N-2$ équations,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \sum_{k=0}^N \frac{\tilde{A}_k T_k(x) T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx &= 0 \\ \sum_{k=0}^N \tilde{A}_k \int_{-1}^1 \frac{T_k(x) T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx &= 0 \\ \sum_{k=0}^N \tilde{A}_k \frac{\pi}{2} c_n \delta_{kn} &= 0 \\ \tilde{A}_n &= 0 \end{aligned}$$

puisque $c_n = 1$ si $n > 0$. Cela nous donne le système suivant,

$$(D^2 + D - 2I)\vec{a} = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Il faut encore ajouter les conditions aux bords que l'on calcule facilement en utilisant (3),

$$B\vec{a} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & -1 & \dots & (-1)^{N-1} & (-1)^N \end{pmatrix} \vec{a} = \vec{0} \quad (11)$$

En combinant ces 2 systèmes, on obtient un système matriciel $N \times N$,

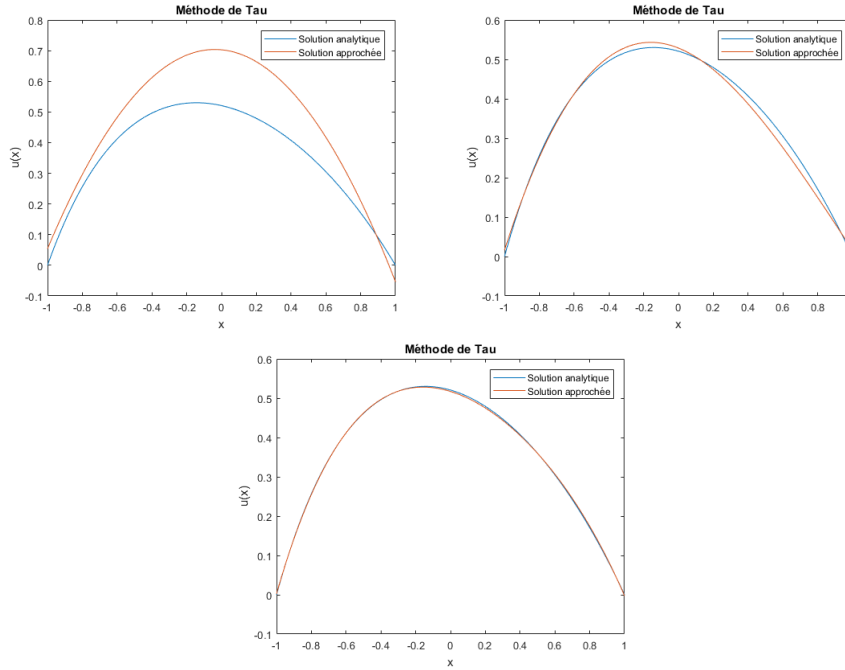
$$\begin{pmatrix} (D^2 + D - 2I) \\ G \end{pmatrix} \vec{a} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

On résout ce système en Matlab. Cela donne les coefficients suivants en fonction de N ,

	N=1	N=2	N=3	N=4	N=5	N=6	N=7	N=8
a_0	0	0,3333	0,3514	0,2724	0,2740	0,2742	0,2742	0,2742
a_1	0	0	-0,0541	-0,0444	-0,0357	-0,0360	-0,0360	-0,0360
a_2		-0,3333	-0,3514	-0,2562	-0,2586	-0,2600	-0,2599	-0,2599
a_3			0,0541	0,0444	0,0334	0,0337	0,0339	0,0339
a_4				-0,0162	-0,0154	-0,0138	-0,0139	-0,0139
a_5					0,0024	0,0023	0,0021	0,0021
a_6						-0,0004	-0,0004	-0,0004
a_7							0,0001	0,0001
a_8								0

On observe que pour $N \geq 8$ les coefficients se stabilisent et les a_k s'annulent tous à partir de $k \geq 8$. On peut comparer la solution approchée par la méthode de Tau avec la solution exacte pour quelques valeurs de N,

FIGURE 1 – Résolution par la méthode de Tau a) N=3, b) N=4, c) N=5



2.5 Méthode de Galerkin

Voyons maintenant ce qu'on obtient avec la méthode de Galerkin. Cette méthode repose sur le même principe que la méthode de Tau, la seule différence étant que l'on utilise des autres fonctions de bases dans le calcul de la moyenne du résidu. On va utiliser les fonctions suivantes,

$$\Phi_n = \begin{cases} T_n(x) - T_0(x), & \text{si } n \text{ est pair} \\ T_n(x) - T_1(x), & \text{si } n \text{ est impair} \end{cases} \quad (12)$$

A nouveau, nous allons simplifier le système d'équations suivant (avec $n \geq 2$).
Pour **n pair**,

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 \frac{R(x)\Phi_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx &= 0 \\
\int_{-1}^1 \sum_{k=0}^N \tilde{A}_k T_k(x) \frac{(T_n(x) - T_0(x))}{\sqrt{1-x^2}} dx &= 0 \\
\sum_{k=0}^N \tilde{A}_k \int_{-1}^1 \frac{T_k(x)T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} - \frac{T_k(x)T_0(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx &= 0 \\
\sum_{k=0}^N \tilde{A}_k \left(\frac{\pi}{2} c_n \delta_{kn} - \frac{\pi}{2} c_0 \delta_{k0} \right) &= 0 \\
\tilde{A}_n c_n - 2\tilde{A}_0 &= 0
\end{aligned}$$

De manière similaire, on obtient pour **n impair**,

$$\tilde{A}_n c_n - \tilde{A}_1 = 0$$

Écrivons ce système sous forme matriciel pour $N = 6$,

$$F\vec{A} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \vec{A} = \vec{0}$$

Et en explicitant,

$$\begin{aligned}
F\vec{A} &= F(D^2 + D - 2I)\vec{a} + F \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{0} \\
F(D^2 + D - 2I)\vec{a} &= F \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Finalement, on ajoute les conditions aux bords (11),

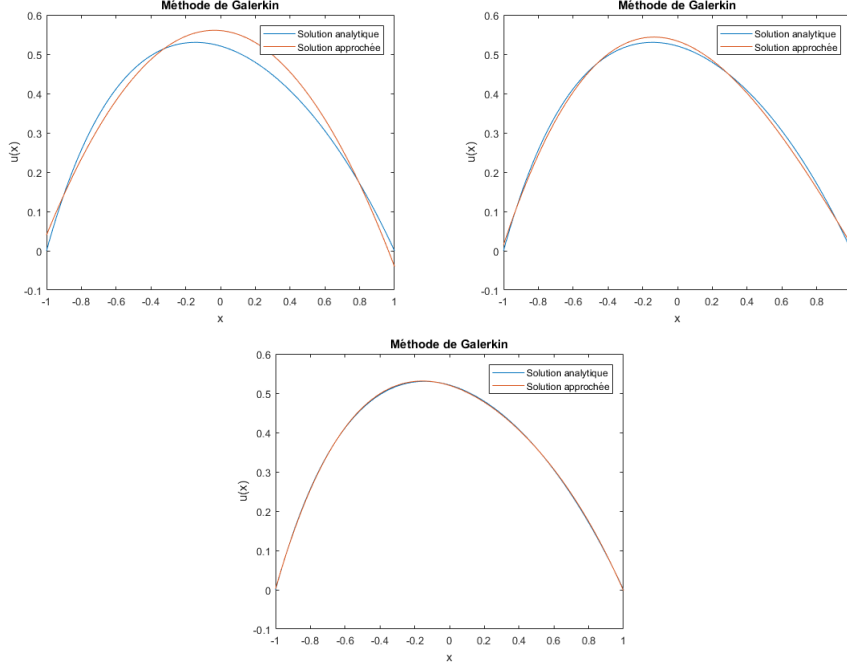
$$\begin{pmatrix} F[D^2 + D - 2I] \\ B \end{pmatrix} \vec{a} = F \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

On résout ce système en Matlab et on trouve les coefficients suivant en fonction de N,

	N=1	N=2	N=3	N=4	N=5	N=6	N=7	N=8
a ₀	0	0,2857	0,2800	0,2741	0,2744	0,2742	0,2742	0,2742
a ₁	0	0	-0,0400	-0,0370	-0,0360	-0,0360	-0,0360	-0,0360
a ₂		-0,2857	-0,2800	-0,2593	-0,2599	-0,2599	-0,2599	-0,2599
a ₃			0,0400	0,0370	0,0338	0,0339	0,0339	0,0339
a ₄				-0,0148	-0,0145	-0,0139	-0,0139	-0,0139
a ₅					0,0022	0,0022	0,0021	0,0021
a ₆						-0,0004	-0,0004	-0,0004
a ₇							0,0001	0,0001
a ₈								0

Il est clair que les coefficients convergent vers les mêmes valeurs obtenues avec la méthode de Tau. La seule différence est que la méthode de Galerkin converge plus rapidement. On observe comment la solution approchée se comporte pour différentes valeurs de N par rapport à la solution analytique,

FIGURE 2 – Résolution par la méthode de Galerkin a) N=3, b) N=4, c) N=5



2.6 Méthode de Collocation

Cette dernière méthode consiste à utiliser comme fonction de base des deltas de dirac $\delta(x-x_i)$ où les x_i sont appelés les points de collocations. Dans notre cas, $x_i = \cos(\frac{i\pi}{N})$. On aura donc $R(x_i) = 0$ pour $i = 1, 2, \dots, N-1$. Les polynômes de Tchebychev évalués en ces points donnent,

$$\begin{aligned} T_n(x_i) &= \cos(n \arccos(x_i)) \\ &= \cos\left(\frac{ni\pi}{N}\right) \end{aligned} \quad (13)$$

On a donc pour $i = 1, \dots, N-1$

$$\begin{aligned} R(x_i) &= \sum_{k=0}^N \tilde{A}_k T_k(x_i) \\ &= \sum_{k=0}^N \tilde{A}_k \cos\left(\frac{ki\pi}{N}\right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (14)$$

Sous forme matriciel,

$$C\vec{A} = \vec{0}$$

$$C[D^2 + D - 2I]\vec{a} + C \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{0}$$

avec $c_{ij} = \cos(\frac{ni\pi}{N})$.

Et en ajoutant les conditions aux bords on trouve,

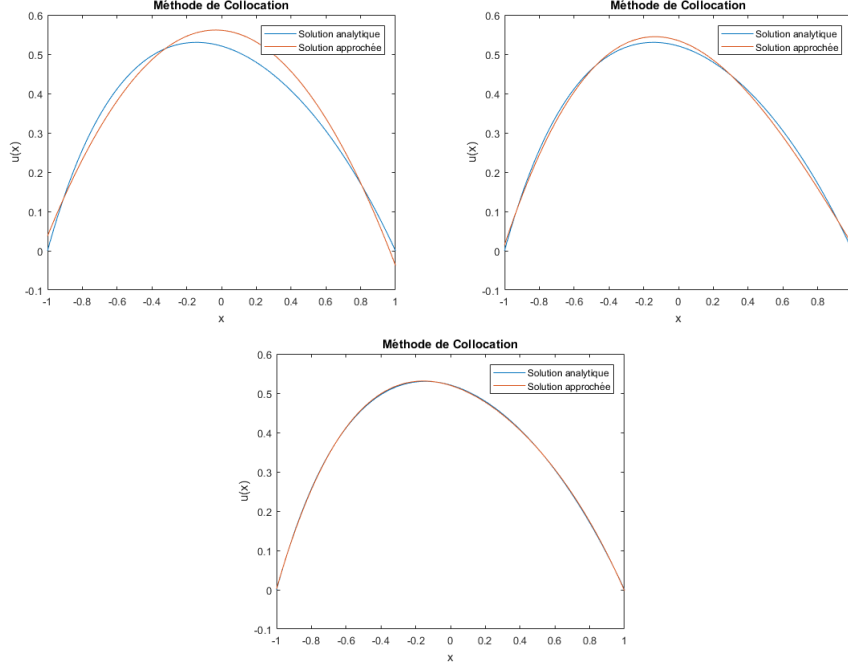
$$\begin{pmatrix} C[D^2 + D - 2I] \\ B \end{pmatrix} \vec{a} = C \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

En résolvant ce système sur Matlab, on trouve les coefficients suivants,

	N=1	N=2	N=3	N=4	N=5	N=6	N=7	N=8
a ₀	0	0,2500	0,2804	0,2743	0,2744	0,2742	0,2742	0,2742
a ₁	0	0	-0,0374	-0,0371	-0,0360	-0,0360	-0,0360	-0,0360
a ₂		-0,2500	-0,2804	-0,2600	-0,2599	-0,2599	-0,2599	-0,2599
a ₃			0,0374	0,0371	0,0339	0,0339	0,0339	0,0339
a ₄				-0,0143	-0,0145	-0,0139	-0,0139	-0,0139
a ₅					0,0022	0,0022	0,0021	0,0021
a ₆						-0,0004	-0,0004	-0,0004
a ₇							0,0001	0,0001
a ₈								0

Encore une fois, on obtient les mêmes valeurs que celles obtenues par les autres méthodes. On remarque que la méthode de Collocation est légèrement plus rapide que celle de Galerkin. Enfin, observons la forme de la solution obtenue par la méthode de Collocation pour N allant de 3 à 5 face à la solution exacte,

FIGURE 3 – Résolution par la méthode de Collocation a) N=3, b) N=4, c) N=5



2.7 Méthode de différence finie

Afin d'évaluer l'efficacité des méthodes spectrales, nous allons résoudre l'équation avec un schéma en différence finie. Nous choisirons pour ce dernier un schéma Euler centré (d'ordre $\mathcal{O}(h^2)$) :

$$v_{xx} = \frac{v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \quad (15)$$

$$v_x = \frac{v_{i+1} - v_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \quad (16)$$

On trouve alors un système de N équations linéaires,

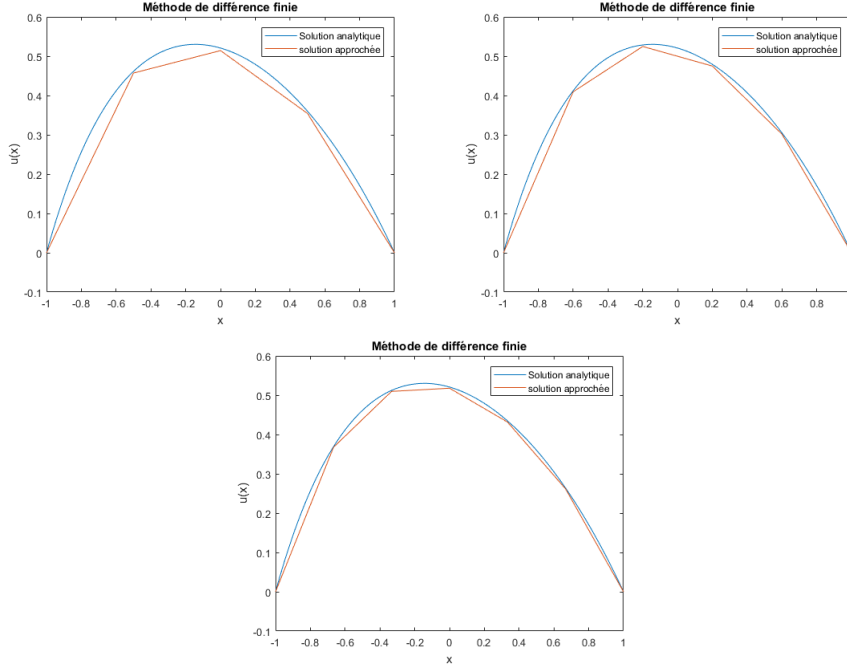
$$\left(1 + \frac{h}{2}\right)v_{i+1} - 2(1 + h^2)v_i + \left(1 - \frac{h}{2}\right)v_{i-1} = -2h^2 \quad (17)$$

On l'écrit sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} -2(1+h^2) & (1+\frac{h}{2}) & 0 & \cdots & 0 \\ (1-\frac{h}{2}) & -2(1+h^2) & (1+\frac{h}{2}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & (1-\frac{h}{2}) & -2(1+h^2) & (1+\frac{h}{2}) \\ 0 & \cdots & 0 & (1-\frac{h}{2}) & -2(1+h^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix} = -2h^2 \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

On résout ce système en Matlab pour quelques valeurs de N :

FIGURE 4 – Résolution par différence finie pour a) $N=3$, b) $N=4$, c) $N=5$



On observe que l'amélioration de la solution numérique est plus lente que celle des méthodes spectrales.

2.8 Comparaison des méthodes

Une manière de comparer les méthodes utilisées dans les sections précédentes est de calculer une erreur faite sur chaque solution approchée. Nous définirons l'erreur comme la valeur absolue de la différence des moyennes quadratiques :

$$\text{err}(n) = \left| \frac{\|v\|^2}{n} - \frac{\|u\|^2}{N} \right|$$

où v est la solution numérique (vecteur de taille n) et u est la solution analytique (vecteur de taille fixe N).

Le schéma suivant permet de comparer l'erreur en fonction de n pour chaque méthode :

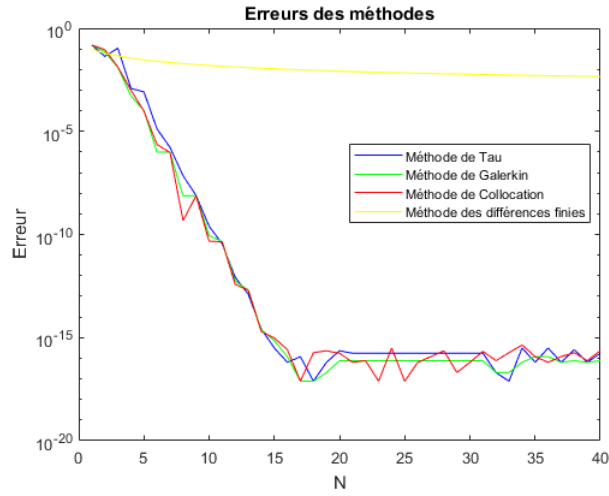


FIGURE 5 – Echelle logarithmique de l'erreur en fonction de N

En voyant ce schéma, il n'y a aucun doute, pour le problème que l'on considère les méthodes spectrales convergent beaucoup plus rapidement que la méthode de différence finie utilisée. Il est certainement possible de modifier le schéma de différence finie pour améliorer sa convergence mais, il n'atteindra pas une convergence telle que l'erreur diminue de manière exponentielle comme c'est le cas pour les méthodes spectrales.

Enfin, comparons le temps de calcul de chaque méthode :

	N=50	N=150	N=500	N=1000
Tau	0.001144	0.006374	0.034178	0.179899
Galerkin	0.005511	0.007390	0.044654	0.223854
Collocation	0.003115	0.005401	0.042227	0.269396
Différence finie	0.0001	0.000298	0.002862	0.013272

Avant toute remarque, notons que la vitesse de ces méthodes dépend de leur implémentation. On observe que le temps de calcul des méthodes spectrales est d'un ordre supérieur à celui de la méthode de différence finie. Donc, si l'on compare les résultats obtenus selon le même ordre de temps, on voit les résultats de la méthode de différence finie est tout à fait comparable à ceux des méthodes spectrales.

3 Excitation électromagnétique d'une particule chargée

3.1 Introduction

Dans cette partie, nous allons montrer comment résoudre l'équation de Schrödinger unidimensionnelle d'une particule placée dans un puit de potentiel et excitée par une impulsion électromagnétique. En représentation $|\vec{r}\rangle$ et dans les unités atomique, l'équation régissant une telle situation prend la forme suivante,

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}(x,t) = \left[\frac{1}{2}P^2 + V(x) + A(t)P \right] \psi(x,t) \quad (18)$$

avec $A(t)$ le potentiel du champ magnétique. On se propose de résoudre cette équation dans le cas où $V(x) = -V_0 e^{-\alpha x^2}$ et $A(t) = A_0 e^{-\frac{t^2}{\sigma}} \sin \omega t$.

3.2 L'équation de Schrödinger indépendante du temps

Pour résoudre cette équation, il va d'abord falloir trouver les fonctions propres ϕ_n de l'équation de Schrödinger indépendante du temps avec leurs énergies associées E_n .

$$\left[\frac{1}{2}P^2 + V(x) \right] \phi(x) = E\phi(x) \quad (19)$$

Nous allons tenter une solution approchée de la forme

$$\phi(x) = \sum_{k=0}^N a_k \varphi_k(x)$$

avec $\varphi_k(x) = c_k H_k(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$ les fonctions de Hermite, $H_k(x)$ les polynômes d'Hermite et $c_k = \frac{1}{\sqrt{2^k k! \sqrt{\pi}}}$. Le choix des fonctions de Hermite comme fonction de base se justifie car ce sont des fonctions définies sur \mathbb{R} et qu'elles jouissent de bonnes propriétés qui simplifieront nos calculs tel que la relation d'orthonormalité suivante [2],

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_k(x) \varphi_{k'}(x) dx = \delta_{kk'} \quad (20)$$

Pour trouver les coefficients a_k , nous injectons la solution dans l'équation (19),

$$\sum_{k=0}^N -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} a_k \varphi_k(x) + \sum_{k=0}^N V(x) \varphi_k(x) a_k = E \sum_{k=0}^N \varphi_k(x) a_k$$

Ensuite, on multiplie par $\varphi_l(x)$ et on intègre sur \mathbb{R} . Ce qui nous donne,

$$\sum_{k=0}^N -\frac{1}{2} a_k \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_l(x) \frac{d^2 \varphi_k}{dt^2}(x) + \sum_{k=0}^N a_k \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_l(x) V(x) \varphi_k(x) = E \sum_{k=0}^N a_k \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_l(x) \varphi_k(x) \quad (21)$$

Nous avons donc 3 intégrales à résoudre. La relation d'orthonormalité (20) nous donne directement le résultat pour celle du membre de droite. Occupons-nous dans un premier temps de la première intégrale du membre de gauche.

1ère intégrale : Pour la résoudre, nous allons utiliser les relations suivantes [2],

$$\varphi''(x) = (x^2 - 2k - 1)\varphi_k \quad (22)$$

$$x\varphi_k = \sqrt{\frac{k}{2}}\varphi_{k-1} + \sqrt{\frac{k+1}{2}}\varphi_{k+1} \quad (23)$$

En utilisant (23) on trouve,

$$\begin{aligned} x^2\varphi_k(x) &= x.x\varphi_k(x) = \sqrt{\frac{k}{2}}x\varphi_{k-1}(x) + \sqrt{\frac{k+1}{2}}x\varphi_{k+1}(x) \\ &= \sqrt{\frac{k}{2}}\left(\sqrt{\frac{k-1}{2}}\varphi_{k-2}(x) + \sqrt{\frac{k}{2}}\varphi_k(x)\right) + \sqrt{\frac{k+1}{2}}\left(\sqrt{\frac{k+1}{2}}\varphi_k(x) + \sqrt{\frac{k+2}{2}}\varphi_{k+2}(x)\right) \\ &= \frac{\sqrt{k(k-1)}}{2}\varphi_{k-2} + \frac{k}{2}\varphi_k + \frac{k+1}{2}\varphi_k + \frac{\sqrt{(k+1)(k+2)}}{2}\varphi_{k+2} \end{aligned}$$

Et en utilisant (22) et le résultat précédent on obtient,

$$\begin{aligned} \varphi_k''(x) &= \frac{\sqrt{k(k-1)}}{2}\varphi_{k-2} + \frac{2k+1}{2}\varphi_k + \frac{\sqrt{(k+1)(k+2)}}{2}\varphi_{k+2} - (2k+1)\varphi_k \\ &= \frac{\sqrt{k(k-1)}}{2}\varphi_{k-2} + \frac{2k+1}{2}\varphi_k + \frac{\sqrt{(k+1)(k+2)}}{2}\varphi_{k+2} \end{aligned} \quad (24)$$

Enfin, en utilisant la relation d'orthonormalité (20) on trouve comme résultat,

$$\begin{aligned} F_{kl} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_l(x)\varphi_k''(x)dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sqrt{k(k-1)}}{2}\varphi_l\varphi_{k-2} + \frac{2k+1}{2}\varphi_l\varphi_k + \frac{\sqrt{(k+1)(k+2)}}{2}\varphi_l\varphi_{k+2}dx \\ &= \frac{\sqrt{k(k-1)}}{2}\delta_{k-2,l} + \frac{2k+1}{2}\delta_{kl} + \frac{\sqrt{(k+1)(k+2)}}{2}\delta_{k+2,l} \end{aligned} \quad (25)$$

2ème intégrale : Passons maintenant à la 2ème intégrale du membre de gauche. Pour résoudre cette dernière, nous allons utiliser la méthode de quadrature de Gauss. Elle permet d'exprimer les intégrales de la forme suivante sous forme d'une somme finie,

$$\int_a^b f(y)\omega(y)dy = \sum_{i=0}^n \omega_i f(y_i) + K_n(f) \quad (26)$$

avec la fonction de poids $\omega(y) > 0$ et intégrable sur l'intervalle $[a, b]$ (fini ou infini). Notons aussi que $K_n(f) = 0$ si $f(y)$ est un polynôme de degré $N < \frac{n}{2}$ [3]. Dans notre cas, nous allons réexprimer l'intégrale du potentiel sous la forme (26) avec $\omega(x) = e^{-x^2}$ et f un polynôme d'ordre N , nous choisirons donc $n > 2N$ pour que le résultat soit exact.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(y)e^{-y^2} dy = \sum_{i=0}^n \omega_i f(y_i) \quad (27)$$

En effectuant le changement de variable $y = \sqrt{\alpha x}$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_l(x) V(x) \varphi_k(x) dx &= -V_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_l(x) e^{-\alpha x^2} \varphi_k(x) dx \\ &= -\frac{V_0}{\sqrt{\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_l\left(\frac{y}{\sqrt{\alpha}}\right) e^{-y^2} \varphi_k\left(\frac{y}{\sqrt{\alpha}}\right) dy \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) e^{-y^2} dy \end{aligned}$$

avec $f(y) = -\frac{V_0}{\sqrt{\alpha}} \varphi_l\left(\frac{y}{\sqrt{\alpha}}\right) \varphi_k\left(\frac{y}{\sqrt{\alpha}}\right)$.

En implémentant la méthode de quadrature de Gauss sur Matlab, on peut calculer pour tout k et l ,

$$U_{kl} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) e^{-y^2} dy = \sum_{i=1}^N \omega_i f(x_i) \quad (28)$$

NB : on se servira de la relation de récurrence suivante pour $n > 0$ [2],

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{n}} x \varphi_{n-1} - \sqrt{\frac{n}{n+1}} \varphi_{n-2}$$

Forme matricielle du système : Avec les résultats (20),(25), et (28) on peut réécrire (21) sous forme matricielle,

$$\left[-\frac{1}{2}F + U \right] \vec{a} = E \vec{a} \quad (29)$$

tel que les coefficients a_k sont les éléments du vecteur \vec{a} . C'est un problème aux valeurs propres qui peut être résolu avec la fonction eig de Matlab. Dans la suite, on utilisera les valeurs de référence suivantes dans un premier temps :

N = 50	$\alpha = 1$	$V_0 = 3$
--------	--------------	-----------

Pour ces valeurs on obtient les énergies suivantes (nous en afficherons juste les 10 premières) :

E ₀	-1,9637
E ₁	-0,3699
E ₂	0,0451
E ₃	0,0697
E ₄	0,1847
E ₅	0,2688
E ₆	0,4263
E ₇	0,5826
E ₈	0,7743
E ₉	1,0031

Nous obtenons donc 2 états liés ! Ensuite, nous utiliserons les valeurs suivantes comme référence :

N = 50	$\alpha = 0,01$	$V_0 = 60$
--------	-----------------	------------

Pour ces valeurs, voici les 10 premières énergies obtenues :

E ₀	-408,2645
E ₁	-383,1919
E ₂	-379,5344
E ₃	-299,6500
E ₄	-294,6201
E ₅	-198,4192
E ₆	-196,8758
E ₇	-98,9003
E ₈	-93,0017
E ₉	1,0403

On trouve ici 9 états liés !

3.3 Équation de Schrödinger dépendante du temps

Nous sommes maintenant en mesure de résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps. On réécrit (18) sous la forme suivante,

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \left[H_0 - iA(t) \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi(x, t) \quad (30)$$

avec $H_0 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$.

Les états propres sont de la forme $\psi_n(x, t) = b_n(t)\phi_n(x)e^{-iE_n t}$ et la solution générale est une superposition linéaire de ces fonctions,

$$\psi_n(x, t) = \sum_{n=0}^N b_n(t)\phi_n(x)e^{-iE_n t} \quad (31)$$

On l'injecte dans (30) :

— Puisque les $\phi_n(x)$ sont les états propres associés à l'hamiltonien H_0 ce terme est très facile à calculer

$$\begin{aligned} H_0 \psi(x, t) &= \sum_{n=0}^N b_n(t) e^{-iE_n t} H_0 \phi_n(x) \\ &= \sum_{n=0}^N b_n(t) e^{-iE_n t} E_n \phi_n(x) \end{aligned}$$

— Le membre de gauche devient

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \sum_{n=0}^N i b'_n(t) \phi_n(x) e^{-iE_n t} + b_n(t) \phi_n(x) E_n e^{-iE_n t}$$

Remarquons que le second terme est égal à l'Hamiltonien appliqué à la solution générale.

— Enfin calculons le 3ème terme,

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) = \sum_{n=0}^N b_n(t) \phi'_n(t) e^{-iE_n t}$$

L'équation de Schrödinger de la particule (30) se transforme en l'expression suivante,

$$\sum_{n=0}^N b'_n(t) \phi_n(x) e^{-iE_n t} = \sum_{n=0}^N -A(t) b_n(t) \phi'_n(x) e^{iE_n t}$$

Nous allons multiplier cette équation par $\phi_m^*(x) = \phi_m(x)$ et intégrer sur l'axe réel pour isoler $b'_m(t)$ et ainsi obtenir un système de N équations différentielles du 1er ordre. On a donc,

$$b'_m(t) = \sum_{n=0}^N -A(t) b_n(t) e^{-i(E_n - E_m)t} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m(x) \phi'_n(x) dx$$

Pour résoudre cette intégrale, nous allons avoir besoin de la relation de récurrence suivante [2],

$$\varphi'_k(x) = \sqrt{\frac{k}{2}} \varphi_{k-1} - \sqrt{\frac{k+1}{2}} \varphi_{k+1} \quad (32)$$

En explicitant les états propres indépendants du temps, en utilisant la relation précédente et avec la relation d'orthonormalité des fonctions de Hermite (20) on obtient,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{l=0}^N a_{ml} \varphi_l(x) \right) \left(\sum_{k=0}^N a_{nk} \varphi'_k \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{l=0}^N a_{ml} \varphi_l(x) \right) \left(\sum_{k=0}^N a_{nk} \left(\sqrt{\frac{k}{2}} \varphi_{k-1}(x) - \sqrt{\frac{k+1}{2}} \varphi_{k+1}(x) \right) \right) dx \\ &= \sum_{l=0}^N \sum_{k=0}^N a_{ml} a_{nk} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sqrt{\frac{k}{2}} \varphi_l(x) \varphi_{k-1}(x) - \sqrt{\frac{k+1}{2}} \varphi_l(x) \varphi_{k+1}(x) \right) \\ &= \sum_{l=0}^N \sum_{k=0}^N a_{ml} a_{nk} \left(\sqrt{\frac{k}{2}} \delta_{l,k-1} - \sqrt{\frac{k+1}{2}} \delta_{l,k+1} \right) \\ &= \sum_{k=0}^N a_{nk} \left(\sqrt{\frac{k}{2}} a_{m,k-1} - \sqrt{\frac{k+1}{2}} a_{l,k+1} \right) \end{aligned}$$

Ce qui nous donne,

$$b'_m(t) = \sum_{n=0}^N -A(t) b_n(t) e^{-i(E_n - E_m)t} \left[\sum_{k=0}^N a_{nk} \left(\sqrt{\frac{k}{2}} a_{m,k-1} - \sqrt{\frac{k+1}{2}} a_{l,k+1} \right) \right] \quad (33)$$

On résout ce système avec la fonction ode15s de Matlab.

3.4 Résultats

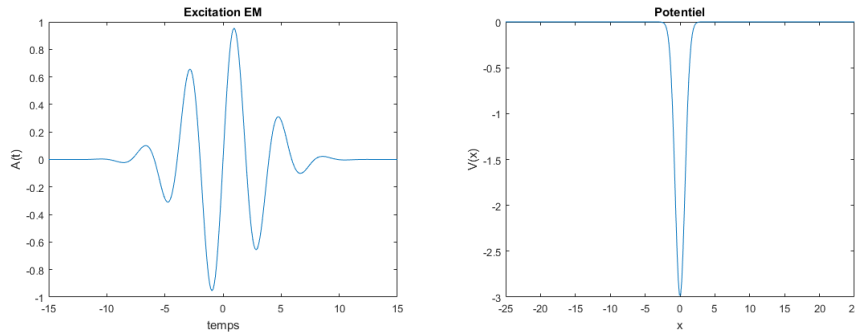
3.4.1 Quelques états liés

Il est temps de tester notre modèle ! Nous prendrons les valeurs suivantes comme référence :

$A_0 = 1$	$\sigma = 20$	$N = 50$	$\alpha = 1$	$V_0 = 3$
-----------	---------------	----------	--------------	-----------

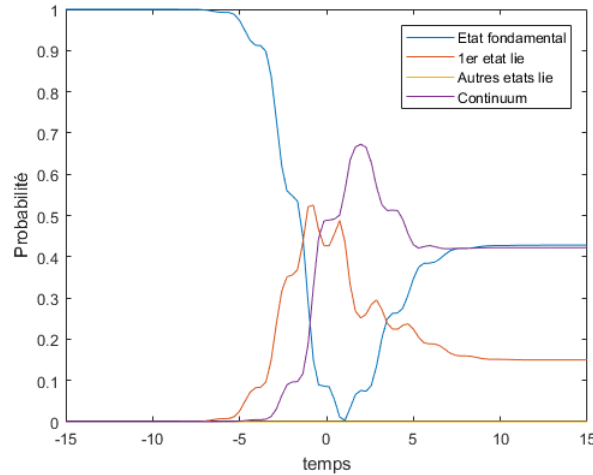
Dans cette situation, l'impulsion électromagnétique et le potentiel ont la forme suivante :

FIGURE 6 – a) Impulsion EM b) Potentiel $V(x)$



On trouve 2 états liés d'énergie respective $E_0 = -1,9637$ et $E_1 = -0,3699$. On prendra comme fréquence la différence d'énergie des deux premiers états liés en valeur absolue, càd dans ce cas-ci $\omega = 1,5938$. On peut voir comment fluctuent leurs probabilités sur le schéma suivant :

FIGURE 7 – Deux états liés



On observe que dès que l'impulsion devient importante, la probabilité que la particule a de se trouver dans l'état fondamental chute brusquement, et la probabilité qu'elle passe dans le premier état lié ou dans le continuum augmente.

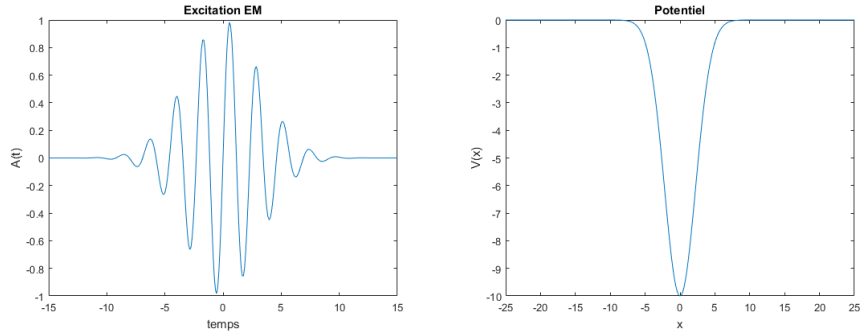
En fait, le potentiel a beau être fort étroit, il n'est pas très profond donc il ne faut pas un apport d'énergie important pour modifier l'état de la particule. On voit qu'une fois que la pulsation devient négligeable, la probabilité de l'état fondamental augmente. Cela est dû au fait que la particule émet spontanément un quanta d'énergie.

Essayons avec les valeurs suivantes :

$A_0 = 1$	$\sigma = 20$	$N = 50$	$\alpha = 0,1$	$V_0 = 10$
-----------	---------------	----------	----------------	------------

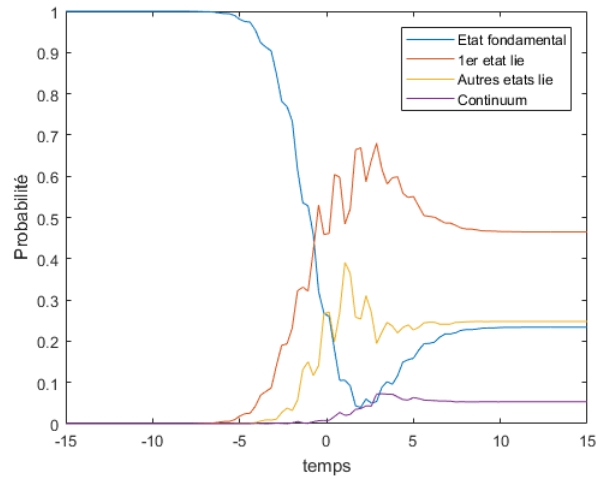
Nous trouvons 13 états liés ! Dans ce cas, la fréquence vaut $\omega = 2,7275$ donc est assez proche de la précédente. Regardons la forme de $V(x)$ et de $A(t)$,

FIGURE 8 – a) Impulsion EM b) Potentiel $V(x)$



L'état des probabilités est de la forme :

FIGURE 9 – Plusieurs états liés $\alpha = 0,1, V_0 = 10$



On observe 3 différences majeures :

1. l'apparition d'une multitude d'états liés,
2. la faible probabilité que la particule a de s'ioniser,
3. le profil des probabilités final montre que la particule a plus de chance de terminer dans le 1e état lié que le fondamental.

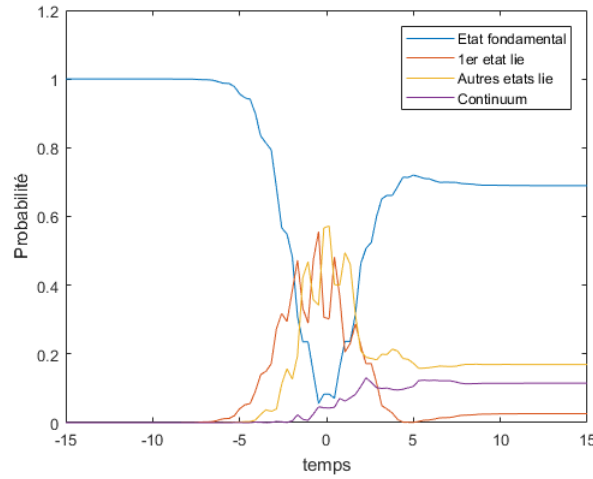
On peut expliquer le second résultat par le fait que le potentiel est plus profond et l'impulsion est trop faible que pour permettre à la particule de passer dans le continuum. Et le dernier peut s'expliquer du fait qu'il y a maintenant beaucoup plus d'états liés dans lesquels peut finir la particule, il y a donc moins de chance pour qu'elle reste dans l'état fondamental.

On peut augmenter la probabilité que la particule se retrouve dans un autre état lié pendant quelques instants en augmentant l'amplitude de l'excitation EM :

$A_0 = 1,5$	$\sigma = 20$	$N = 50$	$\alpha = 0,1$	$V_0 = 10$
-------------	---------------	----------	----------------	------------

NB : la pulsation est la même que dans le cas précédent.

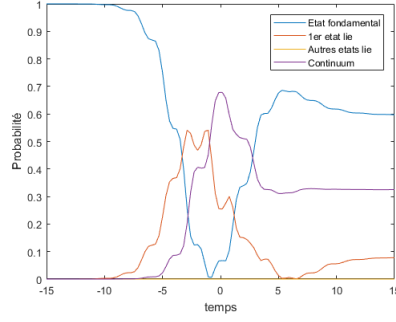
FIGURE 10 – Plusieurs états liés $\alpha = 0,1, V_0 = 10, A_0 = 1,5$



Augmenter l'amplitude revient à envoyer plus de photons (de même énergie) sur la particule, ce qui explique pourquoi elle a plus de chances de passer dans un autre état lié.

Reprenons les valeurs de référence. En doublant la valeur de σ on voit que l'état final des probabilités est modifié, ce qui est dû au fait que la forme de l'impulsion est modifiée.

FIGURE 11 – Deux états liés $\sigma = 40$

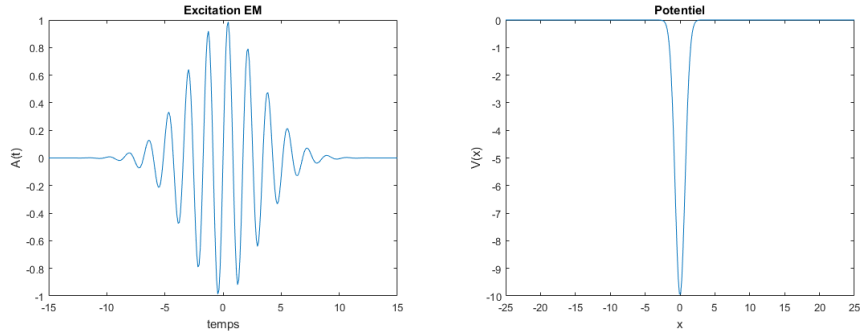


Finalement, voyons ce que nous obtenons pour les valeurs ci-dessous :

$A_0 = 1$	$\sigma = 20$	$N = 50$	$\alpha = 1$	$V_0 = 10$
-----------	---------------	----------	--------------	------------

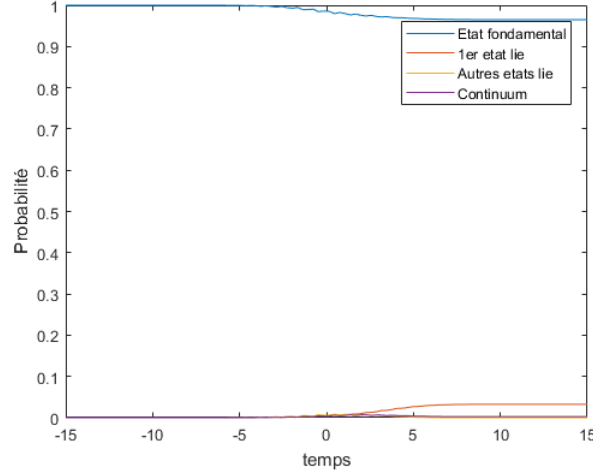
On obtient 4 états liés et une pulsation $\omega = 3,6721$ donc presque 3 fois plus grande que dans le premier cas. L'excitation EM est donc plus forte et le potentiel est plus étroit que précédemment :

FIGURE 12 – a) Impulsion EM b) Potentiel $V(x)$



On trouve comme profil de probabilités :

FIGURE 13 – Plusieurs états liés $V_0 = 10$



Le potentiel est trop profond et trop étroit pour que l'impulsion EM puisse exciter suffisamment la particule pour que la probabilité qu'elle change d'état soit significative.

3.4.2 Oscillations de Rabi

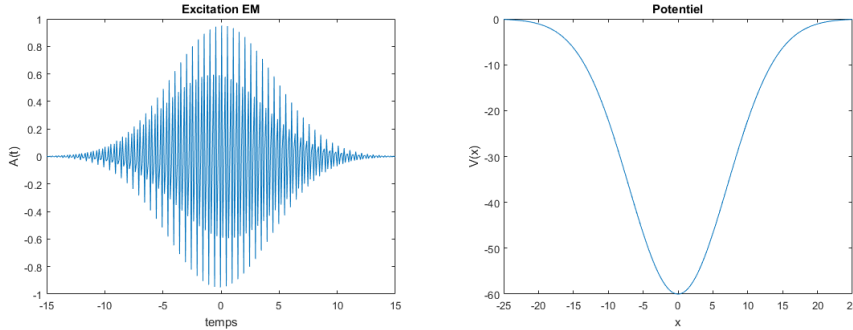
Dans cette section, nous allons utiliser certaines valeurs pour observer des oscillations de Rabi. Les oscillations de Rabi sont des oscillations entre deux états quantiques d'une particule en présence d'un champ oscillant. Elles ont lieu car la particule absorbe des photons (gain d'énergie) et les ré-émet (perte d'énergie) de manière périodique [4]

Nous utiliserons les valeurs de référence suivantes :

$A_0 = 1$	$\sigma = 40$	$N = 50$	$\alpha = 0,01$	$V_0 = 60$
-----------	---------------	----------	-----------------	------------

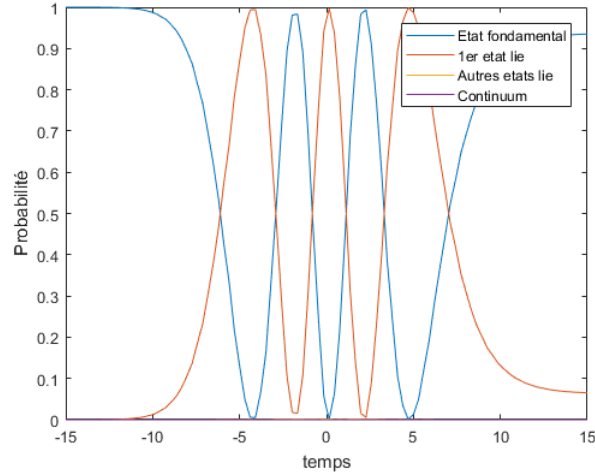
Pour ces valeurs, la pulsation vaut $\omega = 25,0725$. Voici à quoi ressemble l'excitation EM et le potentiel :

FIGURE 14 – a) Impulsion EM b) Potentiel $V(x)$



L'impulsion est donc bien plus énergétique et le potentiel plus profond que dans les cas observés dans la section précédente. On trouve comme profil de probabilités :

FIGURE 15 – Oscillations de Rabi



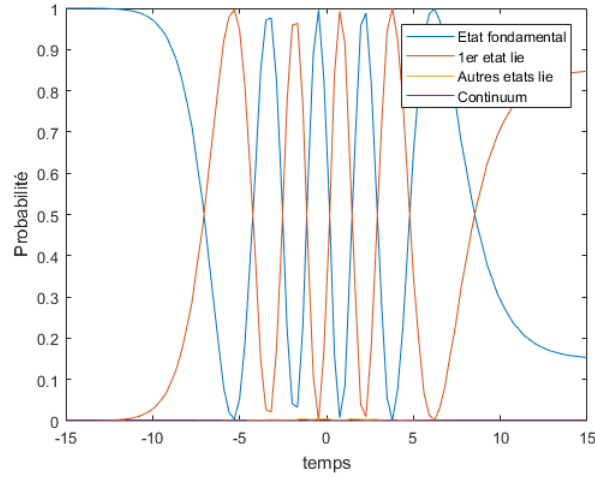
On observe bel et bien des oscillations de Rabi entre l'état fondamental et le premier état lié. Les autres états liés et le continuum sont de probabilités quasi-nulles. Les oscillations entre les deux premiers états oscillent donc quasiment entre -1 et 1 . L'impulsion a beau être plus énergétique, le potentiel est trop profond donc la probabilité que la particule bascule dans le continuum est négligeable.

Essayons de modifier l'amplitude de l'impulsion :

$A_0 = 1,5$	$\sigma = 40$	$N = 50$	$\alpha = 0,01$	$V_0 = 60$
-------------	---------------	----------	-----------------	------------

Les états propres stationnaires et leurs énergies associées restent inchangés donc la pulsation est la même que dans le cas précédent. On trouve les probabilités suivantes :

FIGURE 16 – Oscillations de Rabi $A_0 = 1,5$

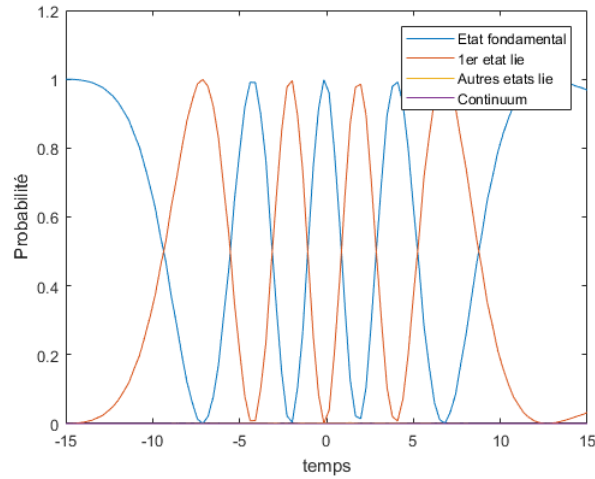


On observe plus d'oscillations de Rabi ! On peut aussi augmenter leurs nombres en augmentant la valeur de σ :

$A_0 = 1$	$\sigma = 80$	$N = 50$	$\alpha = 0,01$	$V_0 = 60$
-----------	---------------	----------	-----------------	------------

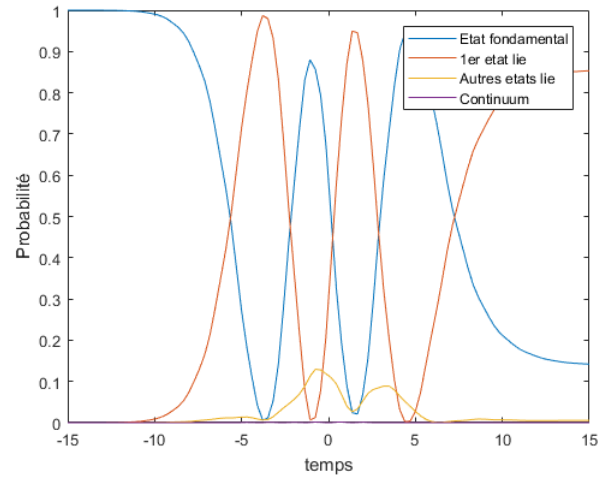
On a alors :

FIGURE 17 – Oscillations de Rabi $\sigma = 80$



Si on se rapproche un peu des valeurs étudiées dans la section précédente on observe que la probabilité que la particule passe dans un autre état lié devient plus importante pendant quelques instants mais diminue une fois que l'impulsion est finie :

FIGURE 18 – Oscillations de Rabi $\alpha = 0, 1, V_0 = 40$



4 Conclusion

Ce travail fut très instructif pour deux raisons principales. D'une part, il nous a permis de nous familiariser avec différentes méthodes de simulation numérique et d'autre part, la seconde partie fut très intéressante d'un point de vue physique. En effet, durant ce dernier quadrimestre nous avons découvert les bases théoriques de la mécanique quantique dans le cours "Mécanique Quantique 2" et nous avons eu l'opportunité de travailler sur un exemple concret dans le cadre de ce cours. De plus, nous avons découvert un phénomène qui nous était inconnu : les oscillations de Rabi. Ces nouvelles connaissances nous seront certainement utiles dans la suite de nos études mais surtout elles nous offrent la satisfaction d'avoir étendu notre savoir sur la physique.

Références

- ¹ *Wolfram : chebyshev polynomial of the first kind*, <http://mathworld.wolfram.com/ChebyshevPolynomialoftheFirstKind.html>.
- ² *Wikipedia : hermite function*, https://en.wikipedia.org/wiki/Hermite_polynomials#Hermite_functions.
- ³ F. J. OLVER, *Nist handbook of mathematical functions* ().
- ⁴ *Rp photonics encyclopedia : rabi oscillations*, https://www.rp-photonics.com/rabi_oscillations.html.