

# TP 4: Équations différentielles partielles

Philippe Després

Date de remise: 2 avril 2021

---

PHY-3500 – Physique numérique (H21)

---

## L'équation de Schrödinger et la méthode de Crank-Nicolson

Soit l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (1)$$

que vous devrez résoudre pour trouver la fonction d'onde d'une particule de masse  $M$  dans une boîte unidimensionnelle de longueur  $L$  avec des parois impénétrables (problème sans potentiel).

En remplaçant la dérivée seconde de l'équation de Schrödinger par une estimation par différences finies, et en appliquant la méthode d'Euler, on retrouve l'équation de la méthode FTCS soit

$$\psi(x, t + h) = \psi(x, t) + h \frac{i\hbar}{2ma^2} [\psi(x + a, t) + \psi(x - a, t) - 2\psi(x, t)] \quad (2)$$

où  $a$  est l'espace entre les points de la grille considérée et  $h$  est l'incrément temporel (attention de ne pas confondre avec  $\hbar$ ).

L'équation de Schrödinger est semblable à l'équation de diffusion et on pourrait croire que la méthode FTCS soit appropriée ici (du moins pour certaines conditions). Malheureusement, FTCS se révèle instable numériquement pour la résoudre. Une analyse de stabilité de type von Neumann vous permettrait de trouver le coupable : l'équivalent du coefficient de diffusion chez Schrödinger qui est complexe.

La méthode de Crank-Nicolson, genre d'hybride à mi-chemin entre la méthode implicite et la méthode FTCS, permet d'arriver à nos fins en toute stabilité.

La méthode de Crank-Nicolson consiste à faire un pas dans la direction inverse ( $h \rightarrow -h$ ) pour obtenir

$$\psi(x, t - h) = \psi(x, t) - h \frac{i\hbar}{2ma^2} [\psi(x + a, t) + \psi(x - a, t) - 2\psi(x, t)]. \quad (3)$$

En effectuant une autre substitution,  $t \rightarrow t + h$ , et en réarrageant on obtient

$$\psi(x, t + h) = \psi(x, t) + h \frac{i\hbar}{2ma^2} [\psi(x + a, t + h) + \psi(x - a, t + h) - 2\psi(x, t + h)]. \quad (4)$$

soit une autre expression pour  $\psi(x, t + h)$  mais qu'on qualifiera d'implicite car dépendant du côté droit de valeurs à  $t + h$ . En présumant que la valeur à  $(x, t + h)$  est la moyenne de ces deux résultats (FTCS et implicite), on obtient

$$\begin{aligned} \psi(x, t + h) = & \psi(x, t) + h \frac{i\hbar}{4ma^2} [\psi(x + a, t) + \psi(x - a, t) - 2\psi(x, t)] \\ & + h \frac{i\hbar}{4ma^2} [\psi(x + a, t + h) + \psi(x - a, t + h) - 2\psi(x, t + h)] \end{aligned} \quad (5)$$

qu'on peut écrire sous cette forme en rassemblant les termes en  $t$  et  $t + h$  de chaque côté

$$\begin{aligned} \psi(x, t + h) - h \frac{i\hbar}{4ma^2} [\psi(x + a, t + h) + \psi(x - a, t + h) - 2\psi(x, t + h)] \\ = \psi(x, t) + h \frac{i\hbar}{4ma^2} [\psi(x + a, t) + \psi(x - a, t) - 2\psi(x, t)]. \end{aligned} \quad (6)$$

Nous aurons donc un ensemble d'équations simultanées à résoudre, une pour chaque point de la grille considérée. La fonction d'onde associée à la particule est forcément nulle aux parois ( $\psi = 0$  à  $x = 0$  et  $x = L$ ) et ce, pour tous les  $t$ . Les valeurs de  $\psi$  pour les points intérieurs sur la grille, aux points  $a, 2a, 3a$  et ainsi de suite, peuvent être exprimés dans un vecteur

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \psi(a, t) \\ \psi(2a, t) \\ \psi(3a, t) \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (7)$$

L'équation Crank-Nicolson (éq. 6) peut alors être écrite de façon compacte

$$\mathbf{A}\psi(t+h) = \mathbf{B}\psi(t) \quad (8)$$

où les matrices  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  sont symétriques et tridiagonales :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & & & \\ a_2 & a_1 & a_2 & & \\ & a_2 & a_1 & a_2 & \\ & & a_2 & a_1 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & & & \\ b_2 & b_1 & b_2 & & \\ & b_2 & b_1 & b_2 & \\ & & b_2 & b_1 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (9)$$

avec les coefficients

$$a_1 = 1 + h \frac{i\hbar}{2ma^2}, \quad a_2 = -h \frac{i\hbar}{4ma^2}, \quad b_1 = 1 - h \frac{i\hbar}{2ma^2}, \quad b_2 = h \frac{i\hbar}{4ma^2}. \quad (10)$$

L'équation (8) est de forme  $\mathbf{Ax} = \mathbf{v}$ , que vous savez maintenant résoudre avec la décomposition LU par exemple. Ici, les matrices  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  sont tridiagonales, ce qui comporte certains avantages computationnels.

Pour étudier la méthode Crank-Nicolson, nous allons considérer un électron ( $M = 9.109 \times 10^{-31}$  kg) dans une boîte unidimensionnelle de longueur  $L = 10^{-8}$  m. Au temps  $t = 0$ , nous allons supposer que la fonction d'onde de l'électron a la forme

$$\psi(x, 0) = \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right] e^{i\kappa x} \quad (11)$$

où

$$x_0 = \frac{L}{2}, \quad \sigma = 1 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad \kappa = 5 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \quad (12)$$

et  $\psi = 0$  aux parois à  $x = 0$  et  $x = L$ <sup>1</sup>. Cette expression pour  $\psi(x, 0)$  n'est pas normalisée mais ceci importe peu pour l'instant parce que l'équation de Schrödinger est linéaire. Vous pourrez toujours renormaliser vos solutions, pour que l'aire sous la courbe de la densité de probabilité soit égale à 1, tel que requis pour respecter la physique du problème.

---

1. La fonction d'onde est typiquement complexe ; ici, elle est purement réelle et le restera au fil de son évolution dans le temps.

# Questions

1. Écrivez un programme qui effectuera un pas selon la méthode Crank-Nicolson pour cet électron, calculant  $\psi(t + h)$  à partir de la condition initiale donnée plus haut (vous utiliserez  $h = 10^{-18}$  s et  $N = 1000$  avec  $a = L/N$ ). La première étape consiste à calculer la quantité  $\mathbf{v} = \mathbf{B}\psi$ , ce que vous ferez sans recourir à une librairie externe mais en exploitant le fait que  $\mathbf{B}$  est tridiagonale (une expression simple pour les  $v_i$  est possible).
2. En deuxième lieu, vous aurez à résoudre le système  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{v}$ , ce que vous ferez dans un premier temps en recourant à un algorithme spécifiquement conçu pour les matrices tridiagonales (voir par exemple algorithme de Thomas).
3. Maintenant que tout est en place, vous pouvez écrire un programme qui calcule  $\psi$  à chaque incrément de temps  $h$ . Vous produirez une animation de l'évolution de la fonction d'onde au cours du temps, en générant une image à chaque incrément temporel. Il y a probablement plusieurs façons d'y arriver, l'une d'elle étant le package `visual`. Prenez soin d'ajuster le taux de rafraîchissement et les échelles pour bien apprécier la dynamique de la fonction d'onde.
4. Modifiez votre programme pour que les opérations d'algèbre linéaire soient effectuées par `numpy.linalg` au lieu des fonctions dédiées aux matrices tridiagonales (pour les opérations avec  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ ) et estimez le gain en vitesse associé.
5. Observez le comportement de la fonction d'onde sur l'animation et décrivez ce qui se passe, en termes physiques bien entendu.

## Instructions pour la remise

Le travail devra être complété en trinômes sous format de cahier de bord `jupyter` (.ipynb) et remis dans la boîte de dépôt créée à cette fin. Ce document contiendra **toutes informations pertinentes** permettant au lecteur d'apprécier vos résultats et conclusions, incluant le code Python utilisé et d'éventuelles références bibliographiques. La qualité de la présentation est très importante (utilisation de sections, de graphiques appropriés, de mise en contexte, etc.).