

## TP 2: Résolution d'équations non-linéaires

Date de remise: 26 février 2021

---

PHY-3500 – Physique numérique (H21)

Professeur : Philippe Després

---

### Le potentiel de Lennard-Jones (crédits à Prof. Louis J. Dubé)

On peut montrer que les états vibrationnels d'une molécule diatomique (par exemple  $O_2$ ) sont solutions de l'équation différentielle suivante

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) \right] \psi_n(r) = E_n \psi_n(r) \quad (1)$$

où  $\psi(r)$  est la fonction d'onde, solution stationnaire de l'équation de Schrödinger, d'une particule de masse  $m$  se déplaçant dans le potentiel  $V(r)$ . Ici,  $r$  est la séparation inter-nucléaire et on utilise la masse réduite  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  au lieu de  $m$  pour simplifier.

Une forme largement utilisée pour modéliser des molécules diatomiques neutres est le potentiel de Lennard-Jones (ou potentiel 6-12) qui s'exprime comme

$$V(r) = 4V_0 \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

où  $V_0$  est une constante ayant la dimension d'énergie représentant la profondeur du puits et  $\sigma$  est une longueur caractéristique propre à chaque molécule. Les états liés de ce potentiel s'étendent de  $-V_0$  à 0.

Dans la théorie des quanta, qui a servi de pont au début du 20<sup>e</sup> siècle entre la physique classique et la physique quantique, le mouvement est décrit par la mécanique classique sauf que seuls les mouvements obéissant à

$$\oint p(r) dr = nh \quad (3)$$

sont permis, où l'intégrale représente l'action (sur une période au complet) qui ne peut prendre que valeurs qui sont des multiples  $n$  de la constante de Planck ( $p$  est l'impulsion). Pour la suite, nous définirons l'action en unité de  $\hbar$  comme

$$S(E) = \frac{1}{\hbar} \oint p(r) dr. \quad (4)$$

En revenant à notre molécule diatomique, le mouvement (classique) des noyaux dans le potentiel  $V(r)$  permet un échange continu entre l'énergie potentielle et cinétique

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + V(r), \quad (5)$$

ce qui permet de définir l'impulsion linéaire locale  $p(r)$  comme

$$p(r) = \pm [2\mu(E - V(r))]^{1/2}. \quad (6)$$

La *quantification de Bohr-Sommerfeld* s'obtient en posant que pour certaines énergies discrètes  $\{E_n\}$ , l'action classique doit être un multiple demi-entier de  $2\pi$ . C'est-à-dire

$$S(E_n) = 2 \left( \frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{r_-}^{r_+} [E_n - V(r)]^{1/2} dr = (n + 1/2)2\pi \quad (7)$$

avec les deux points de rebroussement, notés  $r_-$  et  $r_+$ , où l'impulsion est nulle (positions où les noyaux changent de direction)<sup>1</sup>. Le facteur 2 prend compte de la contribution aller-retour (une période complète).

On introduit maintenant des variables sans dimension

$$\epsilon = \frac{E}{V_0}, \quad x = \frac{r}{\sigma}, \quad \gamma = \left( \frac{2\mu\sigma^2 V_0}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (8)$$

ce qui nous permet de réécrire l'action et le potentiel comme

$$s(\epsilon_n) \equiv \frac{1}{2} S(\epsilon_n V_0) = \gamma \int_{x_-}^{x_+} [\epsilon_n - v(x)]^{1/2} dx = (n + 1/2)\pi \quad (9)$$

$$v(x) = 4 \left[ \left( \frac{1}{x} \right)^{12} - \left( \frac{1}{x} \right)^6 \right]. \quad (10)$$

---

1. L'action discrétisée décrite plus haut fait intervenir des valeurs entières; pour une explication sur l'origine des valeurs demi-entières, voir [https://fr.wikipedia.org/wiki/Approximation\\_BKW](https://fr.wikipedia.org/wiki/Approximation_BKW)

On voit que de par sa définition le paramètre  $\gamma$  est une mesure quantitative de la nature quantique du système. Pour  $\gamma \gg 1$ , nous serons dans un *régime semi-classique* puisque notre unité d'action sera grande devant  $\hbar$ . Tous les éléments mathématiques sont maintenant en place.

L'objectif ici est de déterminer les énergie  $\epsilon_n$  qui vérifient l'équation 9, pour une valeur de  $\gamma$  donnée.

1. Exprimez d'abord les points de rebroussement en fonction de l'énergie  $\epsilon_n$ .
2. Écrivez une fonction qui retournera  $\epsilon$  en fonction de  $\gamma$  et de  $n$ . Vous pouvez utiliser la fonction `scipy.integrate.quad` mais si vous avez besoin de trouver les zéros d'une fonction, vous implémenterez vous-mêmes la méthode de la bisection. Vos valeurs seront précises jusqu'à  $10^{-8}$ .
3. La molécule  $O_2$ , avec ses noyaux relativement lourds, se prête bien à cette modélisation semi-classique. En considérant une valeur de  $\gamma = 150$  pour cette molécule, trouvez les énergies des 20 premiers états vibrationnels. Illustrez ces niveaux sur un graphique qui montrera aussi le potentiel de Lennard-Jones, ainsi que les points de rebroussement correspondant à chaque état vibrationnel.
4. Faites une étude comparative de la vitesse de convergence vers la solution entre la méthode de la bisection et la méthode de la sécante (attention aux points de départ pour ne pas avantager indûment une méthode par rapport à une autre). Dans les deux cas, ce seront vos propres implémentations de ces méthodes. Utilisez le module `timeit` pour le chronométrage si nécessaire. Le critère d'arrêt demeure le même à  $10^{-8}$ . Essayez de démontrer visuellement la convergence quadratique attendue de la méthode de la sécante.

## Pandémie et relaxation

L'équation

$$p = 1 - e^{-R_0 p} \quad (11)$$

intervient dans la modélisation des pandémies, où  $R_0$  est le nombre de reproduction de base et  $p$  le pourcentage de la population qui aura été infecté au terme de la pandémie (oui, ces choses ont une fin)<sup>2</sup>. Selon les dernières données (février 2021), le  $R_0$  de la COVID-19 oscillerait entre 0.8 et 5.7<sup>3</sup>.

5. Écrivez un programme pour déterminer  $p$  avec la méthode de relaxation pour des valeurs de  $R_0$  allant 0 à 5.7 par bonds de 0.01, à une précision d'au moins  $10^{-6}$ . Rapportez vos résultats sous forme de graphique. Vous devriez voir une transition de régime dans lequel on passe de  $p = 0$  à  $p > 0$ . En épidémiologie, cette transition est nommée seuil épidémique.

## Pandémie et relaxation accélérée

Il est possible d'accélérer la convergence de la méthode de relaxation en *poussant* légèrement, en quelque sorte, notre estimé  $x'$  vers la solution à chaque itération. Une petite tape dans le dos qui, on l'espère, permettra de s'approcher plus rapidement de la solution. La relaxation accélérée va comme suit.

On réécrit d'abord l'équation  $x' = f(x)$  sous la forme  $x' = x + \Delta x$  où

$$\Delta x = x' - x = f(x) - x. \quad (12)$$

---

2. Ceci est mon interprétation, probablement erronée, de l'équation. Je ne suis pas épidémiologiste; ici on s'intéresse à résoudre l'équation et on laissera l'interprétation aux spécialistes.

3. [https://en.wikipedia.org/wiki/Basic\\_reproduction\\_number](https://en.wikipedia.org/wiki/Basic_reproduction_number)

Dans la méthode de relaxation accélérée, le prochain estimé est donné par

$$x' = x + (1 + \omega)\Delta x. \quad (13)$$

Si  $\omega = 0$ , l'expression revient à la formulation classique de la méthode de relaxation. Pour  $\omega > 0$ , on a l'effet *petite tape dans le dos*. Comme  $\Delta x = f(x) - x$ , on peut écrire

$$x' = x + (1 + \omega)[f(x) - x] = (1 + \omega)f(x) - \omega x. \quad (14)$$

Le choix de  $\omega$  est important ici. Même s'il existe une valeur optimale, il n'y a malheureusement pas de théorie générale pour la trouver ; essais et erreurs sont de mise ici (l'art du numérique...).

6. Démontrez que l'erreur sur l'estimé  $x'$  est

$$\epsilon' = \frac{x - x'}{1 - \frac{1}{(1+\omega)f'(x)-\omega}}. \quad (15)$$

Inspirez-vous pour ce faire de la démarche qui a conduit à l'expression correspondante pour la méthode de relaxation (équation 6.81 dans le Newman).

7. Considérez de nouveau l'équation  $p = 1 - e^{-R_0 p}$  et rapportez le nombre d'itérations requises pour atteindre la précision de  $10^{-6}$ , pour la valeur de  $R_0 = 2$ , avec la méthode de relaxation.
8. Refaites l'exercice, cette-fois avec la relaxation accélérée. Il vous faudra explorer pour la valeur optimale de  $\omega$ . Une valeur de 0.5 est un bon point de départ. Rapportez sous forme de graphique le nombre d'itérations requises pour atteindre une précision de  $10^{-6}$ , en fonction de  $\omega$ .
9. Y a-t-il des conditions pour lesquelles une valeur de  $\omega < 0$  aiderait à converger plus rapidement que la méthode de relaxation ? La réponse est oui mais pourquoi ?

## 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.).

Prenez soin de bien indiquer votre (ou vos) nom(s) dans le cahier de bord. Pour faciliter la tâche de classification, utilisez la nomenclature suivante pour le fichier transmis (un seul) :

TPn\_nom1\_nom2\_nom3.ipynb