

PHY-3500 – Physique numérique  
Liste des projets 2021

Louis J. Dubé et Philippe Després

printemps 2021

# Table des matières

<b>1</b>	<b>La base</b>	<b>5</b>
1.1	Calculer un sinus, dans les moindres détails . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Intégration numérique</b>	<b>6</b>
2.1	Intégration multi-dimensionnelle et Monte-Carlo . . . . .	6
2.2	Une quadrature gaussienne pour les intégrales de type Kramers-Kronig . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Solution d'équations linéaires et non-linéaires</b>	<b>8</b>
3.1	Méthode de Brent . . . . .	8
<b>4</b>	<b>Problèmes aux valeurs propres</b>	<b>10</b>
4.1	Oscillateurs anharmoniques dans un espace d'Hilbert de dimension finie . . . . .	10
4.2	Oscillateurs anharmoniques discrétisés sur un réseau spatial .	12
4.3	Nouvelles méthodes numériques pour la solution de problèmes 1D . . . . .	13
<b>5</b>	<b>Équations différentielles ordinaires</b>	<b>14</b>
5.1	Le problème à trois corps et les réseaux de neurones artificiels	14
5.2	Mécanique céleste – La comète de Halley . . . . .	15
5.3	Mécanique céleste – Neptune et autres planètes troublantes . .	15
5.4	Un système à $N$ -niveaux sous excitation laser . . . . .	16
5.5	Couplage de deux niveaux lors d'une collision atomique . . . .	18
5.6	Dynamique hamiltonienne et l'intégration symplectique . . .	20
<b>6</b>	<b>Équations différentielles partielles</b>	<b>22</b>
6.1	La méthode de Jacobi revisitée . . . . .	22

---

6.2	Dynamique de réaction-diffusion . . . . .	23
6.3	Dynamique solitonique . . . . .	24
6.4	Propagation d'un faisceau lumineux dans un milieu inhomogène	25
6.5	L'équation d'onde et la méthode implicite de Crank-Nicolson .	26
6.6	Méthode pseudo-spectrale : Propagation d'un paquet d'onde .	27
6.7	Graphes quantiques : problème solutionnable et complexe . . .	31
<b>7</b>	<b>Analyse de Fourier</b>	<b>32</b>
7.1	Efficacité quantique de détection d'un imageur à panneau plat	32
7.2	Transformée de Fourier-Bessel (-Hankel) et l'algorithme $\epsilon$ . . .	35
<b>8</b>	<b>Interpolation, extrapolation et approximation</b>	<b>37</b>
8.1	Interpolation au moyen de splines . . . . .	37
8.2	Approximation au moyen de fonctions rationnelles : approximants de Padé . . . . .	38
<b>9</b>	<b>Méthodes stochastiques</b>	<b>40</b>
9.1	Mouvement brownien et agrégation par diffusion limitée . . . .	40

## Consignes

Tous les projets décrits ici sont *ouverts vers le haut* ; les informations données ne sont qu'indicatives et constituent une base de travail. Puisqu'il s'agit de *Physique numérique*, portez une attention particulière aux choix (et à la justification de ces choix) d'algorithmes et de méthodes utilisées pour résoudre les problèmes qui vous sont proposés. Plusieurs ouvrages de référence tel

*Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing, 3rd Edition*

(NR)

Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P.

(Cambridge Uni. Press, 2007)

devraient être consultés pour s'informer des techniques et algorithmes numériques nécessaires à la résolution des projets décrits plus bas.

## Rapport écrit (15 pages maximum, toutes pages incluses)

Il s'agit essentiellement de rendre compte de la démarche de recherche entreprise, sur le modèle d'un article scientifique. On ne s'attend pas à ce que vous révolutionniez le domaine (il faut attendre le doctorat pour cela) mais à ce que vous maîtrisiez votre sujet (un avant-goût de la maîtrise).

### 1. Structure minimale :

- Page titre
- Résumé
- Introduction
- Méthodes
- Résultats
- Discussion/conclusion
- Bibliographie

### 2. Contenu :

- présenter et développer les concepts importants ;

- établir le lien entre l'analyse, les algorithmes utilisés et la mise en oeuvre ;
- soutenir les résultats par un effort d'analyse ;
- citer les sources aux endroits appropriés.

Les documents (rapport et codes) seront remis de façon électronique par l'entremise d'une boîte de dépôt. Prêtez une attention particulière à la présentation des résultats, tableaux et figures. Le rapport devra être remis en format PDF et tous les fichiers liés ensemble dans un seul fichier (tar, zip, etc.).

## Présentation orale (15 min par projet + 5 min de questions)

La présentation devra s'adresser, non pas au professeur, mais plutôt aux étudiants. Ceux-ci n'étant pas en général familiers avec le sujet traité, il s'agit donc de vulgarisation scientifique. La maxime devra être : *vulgariser sans toutefois trivialisier*.

### Conseils pratiques

- présentation PowerPoint (ou l'équivalent, e.g. Beamer) obligatoire ; porter une attention particulière aux tailles des polices, fond d'écran, à certaines couleurs à éviter, etc... ;
- viser la sobriété sans brimer votre originalité !
- éviter de trop vouloir en mettre sur une seule page d'information ;
- le contenu devrait être un peu comme l'ossature de votre présentation écrite.

## Pondération

Les projets valent 40% de la note finale.

- Rapport écrit et codes (50%)
- Présentation orale (50%)

# Chapitre 1

## La base

### 1.1 Calculer un sinus, dans les moindres détails

Calculer un sinus, aussi simple que d'écrire `sin(x)` vous dites-vous ? Vous avez partiellement raison car derrière cette simple commande se cachent plusieurs opérations et peut-être même un complot d'Intel pour contrôler le monde ! Plus sérieusement, ce projet consiste à comprendre et à vulgariser pour vos pairs des discussions très techniques rapportées ici<sup>1</sup> et ici<sup>2</sup>. Ces hyperliens sont le point de départ d'une exploration qui, de trous de lapin en trous de lapin, pourra vous mener loin (tout comme Alice dans son pays merveilleux). En sortirez-vous indemne ?

---

1. <https://randomascii.wordpress.com/2014/10/09/intel-underestimates-error-bounds-by-1-3-quintillion/>

2. <https://stackoverflow.com/questions/2284860/how-does-c-compute-sin-and-other-math-function>

# Chapitre 2

## Intégration numérique

### 2.1 Intégration multi-dimensionnelle et Monte-Carlo

Alors que les quadratures pour les intégrales 1D sont bien développées et efficaces, il n'en est pas de même pour les intégrales de dimension élevée ( $d > 4$ ). On peut appliquer des méthodes connues (trapèze, Simpson, quadrature gaussienne, ...) pour chaque dimension, mais il est parfois plus utile de considérer une méthode dite de Monte-Carlo où les points d'intégration sont générés de façon (quasi)-aléatoire.

Le comportement de l'erreur commise est fort différent dans les 2 types d'approche. Par exemple, pour une méthode dont l'erreur est  $\mathcal{O}(h^2)$ , on doit augmenter le nombre de points  $N$  par un facteur  $2^{d/2}$  pour une réduction d'un facteur 2 de l'erreur pour une intégrale de dimension  $d$ . Pour la méthode Monte-Carlo, l'erreur est de nature probabiliste et varie comme  $N^{-1/2}$ . Ainsi pour réduire l'erreur d'un facteur 2, il faut augmenter  $N$  d'un facteur 4 *indépendant de la dimension* de l'intégrale.

Le projet consistera donc à comparer l'efficacité des 2 types d'approche sur quelques intégrales que vous choisirez à cet effet. Une fois les avantages et désavantages des approches établies, une tâche intéressante serait d'évaluer

l'intégrale de dimension  $d = 9$

$$I = \int_0^1 \cdots \int_0^1 \frac{da_x da_y da_z db_x db_y db_z dc_x dc_y dc_z}{|(\mathbf{a} + \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}|} \quad (2.1)$$

et d'utiliser suffisamment de points d'intégration pour que l'écart-type estimé soit environ 10% de la valeur estimée de l'intégrale. Un exemple parmi tant d'autres ...

## 2.2 Une quadrature gaussienne pour les intégrales de type Kramers-Kronig

Le projet suivra le développement d'une quadrature gaussienne pour l'évaluation d'une transformée intégrale dite de Kramers-Kronig. Cette relation est d'une utilité considérable dans l'analyse de données optiques par exemple. Elle prend la forme

$$\mathcal{K}\{\mathcal{O}\}(\omega) = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\omega' \mathcal{O}(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2} d\omega' \quad (2.2)$$

où  $\mathcal{P}$  dénote la valeur principale de Cauchy,  $\mathcal{O}$  correspond à une certaine propriété optique (ou autre) et  $\mathcal{K}$  est l'opérateur de Kramers-Kronig. Une forme tronquée de (2.2) sera étudiée pour éliminer le besoin de calculer la valeur principale. La technique est fort récente et bien décrite dans l'article de King (2007), *Numerical evaluation of truncated Kramers-Kronig transforms*, J. Opt. Soc. Am. B**24**, 1589-1595.

Une certaine familiarité avec l'analyse complexe sera un atout pour compléter le projet sans trop de difficultés.



# Chapitre 3

## Solution d'équations linéaires et non-linéaires

### 3.1 Méthode de Brent

La méthode de Brent est utilisée pour trouver les zéros d'une fonction et consiste en un hybride entre la méthode de dichotomie, la méthode de la sécante, et l'interpolation quadratique inverse<sup>1</sup>. Voir aussi<sup>2</sup> et<sup>3</sup>.

Ce projet consiste à retracer les origines de cette méthode et à la comparer avec d'autres méthodes plus rudimentaires (avantages, inconvénients, convergence, etc.). Il s'agira d'implémenter l'approche en Python et à explorer son comportement. Il vous faudra comprendre en détail le fonctionnement de la méthode, afin de pouvoir l'expliquer convenablement. Pour ajouter un peu de défi, vous utiliserez la méthode de Brent (et les autres plus rudimentaires : dichotomie et sécante) pour trouver les racines (jusqu'à la huitième décimale) d'une spline

---

1. Brent, R. P. (1973), "Chapter 4 : An Algorithm with Guaranteed Convergence for Finding a Zero of a Function", Algorithms for Minimization without Derivatives, Englewood Cliffs, NJ : Prentice-Hall, ISBN 0-13-022335-2

2. Press, W. H. ; Teukolsky, S. A. ; Vetterling, W. T. ; Flannery, B. P. (2007). "Section 9.3. Van Wijngaarden–Dekker–Brent Method". Numerical Recipes : The Art of Scientific Computing (3rd ed.). New York : Cambridge University Press. ISBN 978-0-521-88068-8.

3. [https://en.wikipedia.org/wiki/Brent%27s\\_method](https://en.wikipedia.org/wiki/Brent%27s_method)

cubique (naturelle, où la dérivée seconde est nulle aux extrémités) interpolant les données du tableau suivant.

x	y
-2.15	0.012335
-1.42	0.122439
-1.29	0.183396
-0.2	0.962973
0.1	0.992804
0.14	0.977224
0.82	0.523455
1.1	0.293345
1.5	0.105332
2.85	0.000394
3.8	0.0000014

Vous prenez soin d'expliquer l'origine de la condition

$$\left| \frac{P}{Q} \right| < \frac{3}{4} |c - b| \quad (3.1)$$

dans l'algorithme, où la notation utilisée est celle de *Numerical Recipes*. Vous expliquerez aussi pourquoi il est utile de bien *circonscrire* une racine en général, et que c'est essentiel pour la méthode de Brent.

# Chapitre 4

## Problèmes aux valeurs propres

### 4.1 Oscillateurs anharmoniques dans un espace d'Hilbert de dimension finie

Soit l'Hamiltonien  $H$  composé de deux parties

$$H = H_0 + H_1 \tag{4.1}$$

où

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} M \omega^2 x^2 \tag{4.2}$$

est l'Hamiltonien d'un oscillateur harmonique pur et

$$H_1 = \alpha x^3 + \beta x^4 \tag{4.3}$$

représente une perturbation anharmonique.

**i.** Développez les vecteurs propres  $\{|\psi_n\rangle\}$  de  $H$  sur une base non-perturbée de l'oscillateur harmonique,  $\{|\phi_m\rangle\}$ , i.e.

$$|\psi_n\rangle \simeq \sum_{m=0}^{N-1} a_{nm}^{(N)} |\phi_m\rangle \quad (4.4)$$

avec  $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ ,  $H_0|\phi_m\rangle = \epsilon_m|\phi_m\rangle$  et  $\epsilon_m = (m + 1/2)\hbar\omega$ . La représentation de la base non-perturbée dans l'espace des coordonnées  $\langle x|\phi_m\rangle = \phi_m(x)$  s'écrit

$$\phi_m(x) = \left[ \left( \frac{\gamma^2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{2^m m!} \right]^{1/2} e^{-\xi^2/2} \mathcal{H}_m(\xi) \quad (4.5)$$

où  $\mathcal{H}_m(\xi)$  est un polynôme de Hermite et  $\xi = [M\omega/\hbar]^{1/2}x \equiv \gamma x$ .

**ii.** Pour toutes valeurs de  $N$ , le développement (4.4) produit une représentation approximative de la fonction d'onde anharmonique  $\psi_n(x)$ . Une fois introduite dans l'équation de Schrödinger, il en résultera une matrice  $N \times N$  qui servira à obtenir une approximation aux  $N$  premières valeurs propres  $E_n^{(N)}$  pour  $0 \leq n \leq N$  et aux vecteurs propres correspondants grâce aux coefficients  $a_{nm}^{(N)}$ .

Obtenez les éléments de cette matrice analytiquement et/ou numériquement et codez le tout pour une solution numérique du problème aux valeurs et vecteurs propres.

**iii.** En un premier temps, examinez la convergence du développement (4.4) en fonction de  $N$ . Vous prendrez soin de vérifier l'orthonormalité des vecteurs propres pour quelques valeurs de  $N$ .

**iv.** On examinera ensuite le déplacement du spectre  $\{E_n^{(N)}\}$  en fonction des paramètres  $\alpha$  et  $\beta$ .

Une analyse dimensionnelle vous sera d'une aide à ne pas sous-estimer...

## 4.2 Oscillateurs anharmoniques discrétisés sur un réseau spatial

Soit  $H$  l'Hamiltonien d'un oscillateur anharmonique

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (4.6)$$

où le potentiel anharmonique s'écrit

$$V(x) = \frac{1}{2}M\omega^2 x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4. \quad (4.7)$$

Au lieu de solutionner un système aux valeurs propres sur une base de fonctions, on discrétisera l'espace sur une grille unidimensionnelle formée de  $N$  points  $\{x_j\}$  telle que

$$\begin{aligned} x_1 &= -R \\ x_2 &= -R + h \\ \vdots &= \vdots \\ x_j &= -R + (j-1)h \\ \vdots &= \vdots \\ x_N &= -R + (N-1)h = +R \end{aligned} \quad (4.8)$$

avec  $h = 2R/(N-1)$  et  $R$  choisi suffisamment grand pour que  $\psi_n(\pm R) \simeq 0$  où  $H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$ .

**i.** Pour  $N$  et  $R$  fixes, on discrétisera l'opérateur différentiel sur la grille associée pour obtenir une matrice  $N \times N$  dont on tirera les valeurs et les vecteurs propres. Cette approche sera calibrée d'abord par une comparaison avec le cas harmonique pur.

ii. On étudiera ensuite la qualité des solutions obtenues en fonction de  $N$  et  $R$  pour différentes valeurs de  $\alpha$  et  $\beta$ .

Ici, comme toujours, une analyse dimensionnelle vous aidera à partager l'essentiel de l'accessoire.

### 4.3 Nouvelles méthodes numériques pour la solution de problèmes 1D

Il s'agit d'implanter deux méthodes de solution d'équations différentielles lorsque l'opérateur différentiel ne comprend qu'un terme du deuxième ordre. Les méthodes s'appellent : *méthode par dérivée logarithmique* et une version spéciale de la *méthode de Numerov*. L'équation considérée sera de la forme

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + Q(x) \right] \psi(x) = 0 \quad (4.9)$$

où

$$Q(x) = \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(x)] \quad (4.10)$$

avec des conditions aux frontières appropriées et un potentiel  $V(x)$  représentant quelques cas d'intérêt.

Le projet consistera à reproduire les résultats de l'article de Johnson (1977), *New numerical methods applied to solving the one dimensional eigenvalue problem*, J. Chem. Phys. **67**, 4086-4093.

# Chapitre 5

## Équations différentielles ordinaires

### 5.1 Le problème à trois corps et les réseaux de neurones artificiels

L'intelligence artificielle est utilisée à toutes les sauces, dont certaines à l'aspect plus douteux. Ainsi, Green *et al.* ont développé un réseau d'apprentissage profond pour obtenir les solutions du problème à trois corps<sup>1</sup>. Votre travail consistera à reproduire ce travail et à formuler une critique de la méthode proposée, en gardant en tête qu'en physique, on préfère bâtir un modèle à partir des principes de base plutôt que de tomber en amour avec les données.

---

1. <https://doi.org/10.1093/mnras/staa713>

## 5.2 Mécanique céleste – La comète de Halley

Alexis-Claude Clairault est un mathématicien français qui a calculé au 18<sup>e</sup> siècle une date pour le retour au périhélie de la comète de Halley. La méthode utilisée par Clairault est rapportée par Wilson<sup>2</sup>.

Votre travail consistera à revisiter le travail de Clairault, en estimant entre autres la charge de travail que représentaient ces calculs à l'époque. Du point de vue historique, vous vous intéresserez aussi au rôle qu'a joué Nicole-Reine Lepaute dans cette aventure.

## 5.3 Mécanique céleste – Neptune et autres planètes troublantes

La planète Neptune a été découverte dans la nuit du 23 au 24 septembre 1846 suite à des calculs estimant sa position présumée dans le ciel, à partir d'irrégularités observées sur l'orbite d'Uranus (par une planète dite *troublante*). Ce genre de calcul, un problème inverse, était à l'époque toute une épopée et demandait des efforts considérables. Néanmoins, les prédictions de Urbain Le Verrier se sont avérées justes et Neptune a été découverte le jour même que ses coordonnées présumées ont été reçues à l'Observatoire de Berlin.

Ce projet consiste à reproduire la démarche de Le Verrier, cette fois avec des outils modernes. Le projet s'intéressera au cas de Neptune bien sûr mais aussi à celui d'une possible 9<sup>e</sup> et troublante planète, sur la base de données de la sonde Cassini<sup>3</sup>.

---

2. <http://articles.adsabs.harvard.edu//full/1993JHA....24....1W/0000001.000.html>

3. A. Fienga, J. Laskar, H. Manche and M. Gastineau, *Constraints on the location of a possible 9th planet derived from the Cassini data*, Astronomy and Astrophysics, février 2016 (disponible en PDF).



## 5.4 Un système à $N$ -niveaux sous excitation laser

On considère l'absorption de  $N$  photons par un oscillateur anharmonique (lire molécule) d'énergies  $\epsilon_m = \sum_{j=1}^{m-1} \omega_j$  (en unité de  $\hbar = 1$ ). Le laser est représenté par un champ électrique classique et oscillant à une fréquence unique  $\omega$

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t). \quad (5.1)$$

Ce champ couple les niveaux *adjacents* d'un oscillateur avec une constante de couplage  $\beta_m = |\mathbf{E}_0| \mu_m$ , où  $\mu_m$  est le moment de transition dipolaire entre les niveaux  $m$  et  $m + 1$ . Dans une certaine approximation, communément appelée *rotating wave approximation*, les amplitudes d'occupation  $c_m(t)$  de chaque niveau  $\psi_m(\mathbf{r})$  sont obtenus de l'équation de Schrödinger dépendante du temps comme<sup>4</sup>

$$\frac{d}{dt} c_m(t) = \frac{i}{2} \beta_{m-1} c_{m-1} \exp[i(\omega_{m-1} - \omega)t] + \frac{i}{2} \beta_m c_{m+1} \exp[-i(\omega_m - \omega)t] \quad (5.2)$$

pour  $1 \leq m \leq N$  et  $c_0 = c_{N+1} = 0$ .

i. Démontrez que la transformation de phase

$$a_m(t) = c_m(t) \exp[-i(\epsilon_m - (m-1)\omega)t] \quad (5.3)$$

mène à un système d'équations linéaires couplées de la forme générale

$$\frac{d}{dt} \mathbf{a} = i \mathbf{K} \mathbf{a} \quad (5.4)$$

---

4. Il est sous-entendu que nous avons développé la solution complète  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  sur la base des états orthonormaux  $\psi_m(\mathbf{r})$  en absence d'interaction comme  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_m c_m(t) e^{i\phi_m t} \psi(\mathbf{r})$  et où les phases  $\phi_m$  ont été choisies judicieusement.

où vous identifierez explicitement la matrice  $\mathbf{K}$ .

ii. Résolvez le système d'équations grâce à l'Ansatz  $\mathbf{a} = \mathbf{f}e^{\lambda t}$  afin d'obtenir  $N$  valeurs propres  $\{\lambda_i\}$ . La solution générale peut alors s'écrire

$$a_m(t) = \sum_{j=1}^N A_j f_m(\lambda_j) \exp(i\lambda_j t) \quad (5.5)$$

alors que les coefficients  $A_j$  sont fixés par les conditions initiales  $a_m(t=0) = \delta_{m1}$ , i.e. que la molécule est initialement dans l'état fondamental.

iii. La probabilité d'occupation du niveau  $m$  au temps  $t$  est

$$\begin{aligned} P_m(t) = |c_m(t)|^2 &= |a_m(t)|^2 \\ &= \sum_{i=1}^N A_i^2 f_m^2(\lambda_i) + 2 \sum_{i=1, i \neq k}^N \sum_{k=1, k < i}^N A_i A_k f_m(\lambda_i) f_m(\lambda_k) \cos[(\lambda_i - \lambda_k)t] , \end{aligned}$$

alors que la moyenne aux longs temps  $\overline{P}_m$  se réduit au premier terme de la somme.

Pour le cas spécial d'un système à trois niveaux d'espacements égaux ( $\omega_2 = \omega_1$ ) et d'éléments de matrice dipolaire aussi égaux ( $\beta_2 = \beta_1$ ), le système d'équations couplées peut être résolu analytiquement. Obtenez d'abord ce résultat analytique. Ensuite mettez en graphique les probabilités  $\overline{P}_m$  de ce système en fonction de la fréquence laser  $\omega$ . Vous utiliserez votre solution analytique pour valider l'exactitude de votre calcul numérique. Pour ajouter un certain réalisme à ce projet, vous utiliserez les paramètres  $\beta_1/2\pi = 4.37 \text{ cm}^{-1}$  et  $\omega_1/2\pi = 948 \text{ cm}^{-1}$  et un intervalle de fréquences laser appropriées. Ces paramètres correspondent à peu près à l'excitation du mode  $\nu_3$  de la molécule  $\text{SF}_6$  à l'aide d'un laser  $\text{CO}_2$  de  $10^9 \text{ W/cm}^2$ .

## 5.5 Couplage de deux niveaux lors d'une collision atomique

Deux atomes, l'un d'entre eux dans un état excité, s'approchent dans une collision frontale (*head-on collision*). Quelle est la probabilité qu'après la collision, l'excitation ait été transférée à l'autre atome? Voilà la question.

Cette situation (et la réponse à notre question) peut être décrite par le modèle simplifié suivant. Soient  $|\phi_1\rangle$  et  $|\phi_2\rangle$  les états de l'atome 1 et 2 respectivement. On développera l'état du système composé comme

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)|\phi_1\rangle + c_2(t)|\phi_2\rangle \quad (5.6)$$

qui obéit à l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$H(t)|\psi(t)\rangle = i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle \quad (\text{unité où } \hbar = 1). \quad (5.7)$$

Supposant que  $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$ , l'insertion de (5.6) dans (5.7) nous mène à un système d'équations couplées

$$i\frac{d}{dt}c_1(t) = H_{11}c_1(t) + H_{12}c_2(t) \quad (5.8)$$

$$i\frac{d}{dt}c_2(t) = H_{21}c_1(t) + H_{22}c_2(t). \quad (5.9)$$

i. Au moyen de la transformation de phase

$$a_{1,2} = c_{1,2} \exp\left(\frac{1}{2}i \int_{-\infty}^t [H_{11} + H_{22}] dt'\right) \quad (5.10)$$

obtenez et solutionnez les équations différentielles couplées pour les amplitudes complexes  $a_{1,2}$  sous les conditions initiales

$$a_1(t = -\infty) = 1 \quad , \quad a_2(t = -\infty) = 0 \quad (5.11)$$

qui correspondent à l'atome 1 se trouvant dans l'état excité avant la collision. Vous utiliserez les paramètres simplifiés

$$\frac{1}{2}(H_{11} - H_{22}) = \alpha \quad , \quad H_{12} = H_{21} = \beta \exp(-\delta R) \quad (5.12)$$

où  $\alpha$ ,  $\beta$ , et  $\delta$  sont réels et  $R(t)$  est la distance centre à centre des deux atomes. La collision commence à  $t = -\infty$  et se termine à  $t = \infty$  avec  $R(t) = v|t|$  où  $v$  est la vitesse relative des deux atomes.

**ii.** Calculez la probabilité  $P_2(t) = |a_2(t)|^2$  pour  $t \rightarrow \infty$  en fonction de la vitesse  $v$ . Utilisez des paramètres réalistes  $\alpha \simeq 1.0$ ,  $\delta \simeq 1.0$  et  $\beta < \alpha$ . Pouvez-vous obtenir des résultats analytiques pour comparer à vos résultats numériques ?

**iii.** Qu'est-ce qui se passe si  $\alpha$  est complexe ? Explorez.

## 5.6 Dynamique hamiltonienne et l'intégration symplectique

Soit un système hamiltonien à  $N$  degrés de liberté et son espace des phases de dimension  $2N$ . Une application (ou transformation)  $\psi(q, p)$  est dite symplectique si elle vérifie

$$\mathbf{M}_\psi^T \circ \mathbf{J} \circ \mathbf{M}_\psi = \mathbf{J}, \quad (5.13)$$

où  $\mathbf{M}$  est le Jacobien de la transformation (matrice  $2N \times 2N$ ), et

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

et  $\mathbf{I}$  représente la matrice unité de dimension  $N \times N$ . On vérifie aisément que ceci implique que  $\det \mathbf{M}_\psi = 1$  et que la transformation préserve les aires. Pour obtenir un intégrateur symplectique à pas fixe (ISPF), il s'agit essentiellement de remplacer le flot (l'évolution dans l'espace des phases) défini par

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \quad (5.15)$$

par une application symplectique

$$\psi_h(\mathbf{q}, \mathbf{p}) : [\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)]^T \mapsto [\mathbf{q}(t+h), \mathbf{p}(t+h)]^T \quad (5.16)$$

où  $h$  représente le pas d'intégration que l'on veut accomplir. On construit alors facilement une trajectoire complète par itérations successives de  $\psi_h$  appliquée à une certaine condition initiale :

$$[\mathbf{q}(t_0), \mathbf{p}(t_0)]^T \mapsto [\mathbf{q}(t_0+h), \mathbf{p}(t_0+h)]^T \mapsto [\mathbf{q}(t_0+2h), \mathbf{p}(t_0+2h)]^T \mapsto \dots \quad (5.17)$$

Puisque la composition de transformations symplectiques est aussi une transformation symplectique, les invariants de Poincaré sont préservés et la trajectoire obtenue est qualitativement équivalente à la solution exacte du système hamiltonien considéré.

Par convention, on dit qu'une méthode d'intégration numérique est d'ordre  $n$  si l'erreur sur chaque pas d'intégration  $h$  est  $\mathcal{O}(h^{n+1})$ . Donc, pour obtenir un IS d'ordre  $n$ , l'application  $\psi_h$  doit vérifier la condition de symplecticité (5.13) et décrire le système hamiltonien (5.15) à une précision  $\mathcal{O}(h^n)$ .

Le projet consistera à construire des intégrateurs symplectiques et de comparer leurs performances à celles des intégrateurs de type Runge-Kutta par exemple. Inutile de refaire la roue, ce travail a été fait dans la thèse de Poulin R., *Intégration symplectique et étude dynamique de systèmes hamiltoniens* (Uni. Laval, 1997)<sup>5</sup> où tous les détails nécessaires pour compléter un tour d'horizon de ce genre d'intégrateurs sont développés.

---

5. Une copie pdf de cette thèse est disponible. Elle vous sera transmise si le besoin se faisait sentir.

# Chapitre 6

## Équations différentielles partielles

### 6.1 La méthode de Jacobi revisitée

La méthode de Jacobi permet de trouver une solution discrétisée (à partir de différences finies) pour des équations différentielles partielles elliptiques comme l'équation de Laplace ou de Poisson. Cette méthode itérative, qui date du 19<sup>e</sup> siècle, converge lentement et est surtout utilisée à des fins pédagogiques. Or, un papier récent <sup>1</sup> présente une façon d'accélérer substantiellement l'algorithme, nommée *Schedule relaxation Jacobi (SRJ) schemes*. Ce projet consiste à explorer cette méthode, notamment sa stabilité (la méthode par surrelaxation est réputée instable sur des maillages carrés) et sa rapidité. À cet égard, on se rappellera que, contrairement à la méthode Gauss-Seidel, la méthode de Jacobi est facilement parallélisable. Ce projet pourrait être l'occasion de comparer une implémentation sur processeur graphique (GPU) et de comparer à Gauss-Seidel par exemple.

L'article de Yang et Mittal a récemment fait l'objet d'autres travaux qui

---

1. Xiyang I.A. Yang and Rajat Mittal. Acceleration of the Jacobi iterative method by factors exceeding 100 using scheduled relaxation. In *Journal of Computational Physics*, Vol. 274 :695 - 708, 2014 (disponible en PDF).

pourraient vous intéresser<sup>2</sup>. L'équation (39) de cet article pourrait servir de banc d'essai pour votre méthode.

## 6.2 Dynamique de réaction-diffusion

Le terme combiné *réaction-diffusion* réfère au couplage de la diffusion avec une cinétique réactionnelle nonlinéaire. L'exemple 1D le plus simple nous est donné par l'*équation de Fisher* qui couple la diffusion linéaire avec la croissance logistique

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + g \Psi(1 - \Psi) \quad (6.1)$$

où  $D$  est la constante de diffusion et  $g$  la constante de couplage de croissance. Pour  $g = 0$ , l'équation (6.1) possède une solution analytique et décrit la diffusion uniforme en 1D. Pour  $g > 0$ , deux classes de solution sont d'intérêt. La première décrit la propagation d'un front d'impulsions qui apparaît dans certains signaux chimiques, l'évolution d'une population et le transfert de masse et de chaleur. La seconde classe consiste en des patrons spatiaux observés dans des réactions chimiques et prédits par Turing *circa* 1952.

Le calcul numérique de ces classes de solution demande un effort particulier qui est fort bien explicité au chapitre 6 du livre de Phillipson et Schuster, *Modeling by Nonlinear Differential Equations* (World Scientific, 2009)<sup>3</sup>.

---

2. J. E. Adsuara, I. Cordero-Carrión, P. Cerdá-Durán and M. A. Aloy. Scheduled Relaxation Jacobi method : improvements and applications. 2015 (arXiv :1511.04292)

3. Le livre est disponible en format PDF.



## 6.3 Dynamique solitonique

Un soliton représente un objet structurellement stable qui peut maintenir son identité même après une (ou plusieurs) interaction(s) avec des objets de même nature. Certaines équations aux dérivées partielles, développées par Korteweg-de Vries en hydrodynamique vers 1895, ont donné naissance à la dynamique solitonique et impulsé aux développements théoriques et expérimentaux dans le domaine.

L'existence d'importants solitons peut être établi dans le cadre de la dynamique conservative de la mécanique newtonienne. Ceci implique d'exprimer les forces inter-particules dans un système à  $N$  particules localisées sur un réseau et de considérer la transition vers une situation où  $N \rightarrow \infty$  de sorte que le système particulaire devient un champ continu. Par un choix approprié des fonctions de force, les équations aux dérivées partielles décrivant les solitons peuvent reproduire les observations. Les équations obtenues de la dynamique sur réseau produiront en particulier des structures solitoniques décrites par l'équation de Korteweg - de Vries (KdV) et l'équation de sine-Gordon (siG).

L'objet de ce projet est d'étudier le comportement de ces deux équations (célèbres) et un bon endroit pour s'affranchir de la théorie attenante se trouve au chapitre 7 du livre de Phillipson et Schuster, *Modeling by Nonlinear Differential Equations* (World Scientific, 2009)<sup>4</sup>.

---

4. Le livre est disponible en format PDF.

## 6.4 Propagation d'un faisceau lumineux dans un milieu inhomogène

La propagation ondulatoire dans un milieu inhomogène où l'indice de réfraction dépend des coordonnées spatiales donne lieu à des phénomènes fascinants en optique. Les équations de Maxwell avec une permittivité  $\epsilon(x, y, z)$  doivent être en général solutionnées de façon numérique avec des méthodes appropriées. Au delà des méthodes aux différences finies, les *méthodes pseudo-spectrales* sont souvent préférées grâce à leur rapidité relative. La *méthode de propagation de faisceau* ('beam propagation method', BPM) est un exemple de méthode pseudo-spectrale.

Après s'être affranchi des connaissances nécessaires à l'utilisation de la méthode BPM, on s'intéressera à la *propagation d'un faisceau gaussien* dans un *milieu Kerr*<sup>5</sup> où on observera les phénomènes nonlinéaires d'auto-focalisation et de défocalisation.

Conscient que certains éléments de ce projet peuvent être inconnus (méconnus), la tâche d'apprentissage en est simplifiée par la lecture assidue du chapitre 3 de Poon et Kim, *Engineering Optics with MATLAB* (World Scientific, 2006)<sup>6</sup>.

---

5. L'effet Kerr décrit la dépendance nonlinéaire de l'indice de réfraction au champ électrique  $E$  dans un faisceau lumineux,  $n = n_0 + n_2|E|^2$ , où  $n_0$  est l'indice de réfraction en absence de champ et  $n_2$  es la constante de Kerr. Un milieu qui peut produire un tel effet est appelé milieu Kerr.

6. Le livre est disponible en format PDF.

## 6.5 L'équation d'onde et la méthode implicite de Crank-Nicolson

L'équation d'onde en 1D s'écrit

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) = v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} . \quad (6.2)$$

Une méthode numérique qui fonctionne fort bien pour l'équation de diffusion

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} . \quad (6.3)$$

est la méthode FTCS (*Forward Time Centered-Space*) qui consiste à discrétiser la dérivée partielle en temps par une expression avancée impliquant les temps  $t + \delta t$  et  $t$ , alors que la dérivée partielle dans l'espace est plutôt symétrique et combine les points  $x + \delta x$ ,  $x$  et  $x - \delta x$ . Cette méthode FTCS devra maintenant être appliquée à l'équation d'onde qui gouverne la solution du problème décrit plus bas. Notez qu'il faudra d'abord transformer (6.2) en un système de deux équations couplées du premier ordre.

i. Vous considérerez le problème de la corde vibrante, en particulier celle d'une corde de piano frappée par un marteau. La corde de piano de longueur  $L$  est initialement au repos. Au temps  $t = 0$ , la corde est frappée par le marteau du piano à une distance  $d$  du bord de la corde. La corde va donc vibrer sauf aux points  $x = 0$  et  $x = L$  où elle est maintenue fixe. Écrivez un programme utilisant la méthode FTCS pour résoudre l'équation (6.2) avec  $v = 100 \text{ ms}^{-1}$ , et une condition initiale  $\psi(x, t = 0) = 0$  partout, mais avec un profile de vitesse  $\phi(x, t = 0)$  donné par

$$\phi(x, t = 0) = C \frac{x(L - x)}{L^2} \exp \left[ -\frac{(x - d)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (6.4)$$

où  $L = 1 \text{ m}$ ,  $d = 10 \text{ cm}$ ,  $C = 1 \text{ ms}^{-1}$ , et  $\sigma = 0.3 \text{ m}$ . Il vous faudra ajuster  $\delta t$  et  $\delta x$  pour obtenir une solution appropriée. Une analyse dimensionnelle vous indiquera les valeurs caractéristiques de temps et de distance.

ii. Vos simulations devraient vous mener à la conclusion que cette méthode FTCS n'est pas stable pour l'équation d'onde. Vous pourrez en faire une analyse de stabilité, numériquement et/ou analytiquement.

iii. Pour pallier à cette fâcheuse situation, il existe une *méthode implicite* dite *de Crank-Nicolson* qui s'applique fort bien à l'équation d'onde. Après une introduction de la méthode, vous reprendrez le problème précédent et montrerez en effet qu'il s'agit là non seulement d'une bonne idée, mais de la solution numérique propre aux équations d'onde.

## 6.6 Méthode pseudo-spectrale : Propagation d'un paquet d'onde

Ce projet s'intéresse à la propagation d'un paquet d'onde (une particule) sujet à l'équation de Schrödinger dépendante du temps (d'abord en une dimension)

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) \\ &\equiv [\hat{\mathbf{T}} + \hat{\mathbf{V}}] \psi(x, t) \end{aligned} \quad (6.5)$$

où  $m$  est la masse de la particule,  $\hat{\mathbf{T}}$  est l'opérateur (différentiel) d'énergie cinétique, et  $\hat{\mathbf{V}}$  est l'opérateur (scalaire) représentant le potentiel. La solution *formelle* de (6.5) peut s'écrire

$$\psi(x, t) = \exp \left[ -i(\hat{\mathbf{T}} + \hat{\mathbf{V}})(t - t_0)/\hbar \right] \psi(x, t_0), \quad (6.6)$$

décrivant la propagation de la fonction d'onde d'un temps  $t_0$  à un temps  $t$ . Alors qu'on peut se convaincre facilement que

$$e^{(\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{B}})} \neq e^{\hat{\mathbf{A}}} e^{\hat{\mathbf{B}}} \quad (6.7)$$

en général (l'égalité ne tenant que lorsque  $[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = 0$ ), le côté droit de cette équation pourrait nous servir d'*approximation* pour le côté gauche correspondant à notre *opérateur d'évolution*.

Soit  $\delta t = (t - t_0)$ , une décomposition symétrique nous mènera à l'expression suivante :

$$e^{-i[\hat{T}+\hat{V}]\delta t/\hbar} \simeq e^{-i\hat{V}\delta t/2\hbar} e^{-i\hat{T}\delta t/\hbar} e^{-i\hat{V}\delta t/2\hbar} + \mathcal{O}(\delta t^2). \quad (6.8)$$

Cette approche, appelée *séparation d'opérateurs* ('split-operator approach'), va nous mener vers une méthode hybride efficace pour la résolution de problème de diffusion où un mélange judicieux de techniques dans l'espace des coordonnées et dans l'espace conjugué de Fourier sera utilisé. Cette combinaison porte le nom évocateur de *méthode pseudo-spectrale*. En voici, une courte description.

Notre approximation de l'évolution temporelle s'écrit maintenant

$$\psi(x, t) \simeq e^{-i\hat{V}\delta t/2\hbar} e^{-i\hat{T}\delta t/\hbar} e^{-i\hat{V}\delta t/2\hbar} \psi(x, t_0) \quad (6.9)$$

pour une condition initiale connue  $\psi(x, t_0)$ . On définira une fonction intermédiaire

$$\phi(x) = e^{-i\hat{V}\delta t/2\hbar} \psi(x, t_0) \quad (6.10)$$

qui sera évaluée sur une grille de points  $\{x_j\}$  couvrant le domaine spatial d'intérêt. L'étape suivante implique l'évaluation de

$$e^{-i\hat{T}\delta t/\hbar} \phi(x_j). \quad (6.11)$$

Alors que l'exponentielle de la fonction scalaire  $V(x_j)$  est immédiate, un traitement particulier est nécessaire pour l'exponentielle d'un opérateur différentiel. C'est ici qu'un développement spectral vient à la rescousse. Définissons la transformée de Fourier de  $\phi(x)$  :

$$\tilde{\phi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) e^{-ikx} dx \quad (6.12)$$

et son inverse

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\phi}(k) e^{ikx} dk . \quad (6.13)$$

Ceci nous permet d'en venir à

$$e^{-i\hat{T}\delta t/\hbar} \phi(x) = \mathcal{F}^{-1} \left[ e^{-iT(k)\delta t/\hbar} \tilde{\phi}(k) \right] \quad (6.14)$$

où

$$T(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} , \quad (6.15)$$

et le symbole  $\mathcal{F}^{-1}$  signifie la transformée de Fourier inverse. Ainsi la propagation complète sur un intervalle de temps  $\delta t$  prendra la forme

$$\psi(x, t) \simeq e^{-i\hat{V}\delta t/2\hbar} \mathcal{F}^{-1} \left[ e^{-iT(k)\delta t/\hbar} \mathcal{F} \left[ e^{-i\hat{V}\delta t/2\hbar} \psi(x, t_0) \right] \right] . \quad (6.16)$$

Lorsque la FFT est employée pour évaluer numériquement les transformées de Fourier, la procédure complète est non seulement très efficace mais aussi fort précise.

Il ne reste plus qu'à préciser une condition initiale pour notre paquet d'onde. Un choix utile est

$$\psi(x, 0) = \left[ \frac{1}{2\pi(\Delta x)^2} \right]^{1/4} \exp \left[ ik_0 x - \frac{(x - x_0)^2}{4(\Delta x)^2} \right] . \quad (6.17)$$

On reconnaît une onde plane modulée par une distribution gaussienne de largeur  $\Delta x$  centrée en  $x = x_0$ .

Une fois cette méthode pseudo-spectrale mise en oeuvre, on pourra s'intéresser à une série de problèmes de difficulté et / ou d'intérêt croissants :

- i. Étalement d'un paquet d'onde initial :  $k_0 = 0$ , et  $V(x) = 0$ .

- ii. Propagation libre :  $k_0 \neq 0$ , et  $V(x) = 0$ .
- iii. Propagation vers un saut de potentiel :  $k_0 \neq 0$ ,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 > 0 & x \geq 0 \end{cases}$$

On pourra se pencher sur l'évaluation des coefficients de transmission  $\mathcal{T}$  et de réflexion  $\mathcal{R}$ .

- iv. Propagation vers un puits de potentiel ( $V_0 < 0$ ) et/ou une barrière de potentiel ( $V_0 > 0$ ) :  $k_0 \neq 0$ ,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

v. ...

## 6.7 Graphes quantiques : problème solutionnable et complexe

Les problèmes qui possèdent une solution analytique sont rares en physique, et il est toujours un plaisir renouvelé d'en trouver un. Les *graphes quantiques* font partie de ces systèmes qui sont à la fois solutionnable et complexes. Ils représentent d'excellents modèles de complexité quantique, quelque soit votre définition de la complexité. Ce projet vous amènera à définir un graphe, un graphe quantique et de trouver la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps sur cette structure. Le chapitre 8 du livre *Advanced Quantum Mechanics : The Classical -Quantum Connection* de R. Blümel (Jones and Bartlett Pub., 2011)<sup>7</sup> vous instruira sur ce sujet fascinant.

---

7. Le livre est disponible au besoin.



# Chapitre 7

## Analyse de Fourier

### 7.1 Efficacité quantique de détection d'un imageur à panneau plat

L'évaluation objective des performances d'un système de radiologie est basée sur des mesures de résolution spatiale et d'efficacité d'utilisation de la dose, en termes de bruit dans l'image. L'efficacité quantique de détection (*EQD*) rassemble ces caractéristiques en une seule quantité utile pour comparer les systèmes radiologiques entre eux. La procédure officielle pour mesurer l'*EQD* est décrite en détails dans le standard IEC-62220-1<sup>1</sup>

La définition conceptuelle de l'*EQD* est

$$EQD = \frac{RSB_{sortie}^2}{RSB_{entrée}^2}. \quad (7.1)$$

où *RSB* est le rapport signal à bruit. La valeur résultante – entre 0 et 1 – indique comment le système d'imagerie dégrade le bruit présent dans le signal d'entrée au détecteur. Ce bruit d'entrée est de nature quantique; les

---

1. Stefanie Apeldoorn-Rassow *et al.*, Medical electrical equipment – Characteristics of digital X-ray imaging devices – Part 1 : Determination of the detective quantum efficiency. Technical report, International Electrotechnical Commission, 2003 (disponible sur demande).

photons arrivent au détecteur selon un processus de Poisson, ce qui engendre une variance intrinsèque dans le nombre de photons de pixel à pixel. Le système ajoute à ces fluctuations inévitables un bruit qui puise sa source dans les différents processus intervenant dans la formation de l'image finale. Ainsi, l'électronique de lecture et les phénomènes physiques impliqués dans la formation du signal contribuent à augmenter le bruit d'origine. L'idéal est d'avoir un système avec une  $EQD$  de 1, qui n'ajoute pas de bruit à celui déjà présent à l'entrée.

La définition (7.1) doit être transformée pour correspondre à des quantités mesurables. Elle doit aussi être adaptée pour rendre compte du fait que la réaction du système dépend de la fréquence spatiale du signal d'entrée. Dans ce contexte, la  $FTM(f)$  décrit la portion *signal* du RSB de sortie et le spectre en puissance du bruit ( $SPB(f)$ ) la portion *bruit* :

$$RSB_{sortie}^2 = \frac{[FTM(f)]^2}{SPB(f)}. \quad (7.2)$$

L'expression de l' $EQD$  peut être réécrite comme

$$EQD(f) = \frac{[FTM(f)]^2}{Q \cdot X \cdot SPB(f)} \quad (7.3)$$

où  $X$  est l'exposition ayant servi à l'obtention du  $SPB$  et  $Q$  une valeur correspondant à une qualité de faisceau prescrite.

L'objectif de ce projet est de déterminer  $EQD(f)$  pour un système radiologique dont les données et les conditions d'acquisition vous seront fournies, selon les spécifications du document de l'IEC. En particulier, il faudra

1. obtenir la courbe  $FTM(f)$  à partir de l'image d'une caméra à fente, en appliquant la technique de suréchantillonnage décrite par Fujita *et al.*<sup>2</sup>
2. obtenir le  $SPB(f)$  à partir d'une série d'images acquises de la même façon, ce qui permet d'éliminer les composantes à basses fréquences

---

2. Hiroshi Fujita, Du-Yih Tsai, Takumi Itoh, Kunio Doi, Junji Morishita, Katsuhiko Ueda and Akiyoshi Ohtsuka. A simple method for determining the modulation transfer function in digital radiography. In IEEE Transactions on Medical Imaging, Vol. 11 :34-39, 1992 (disponible sur demande).

qui ne sont pas caractéristiques de l'imageur mais plutôt du tube à rayons X (effet talon).

3. obtenir  $EQD(f)$  à partir des données d'acquisition des images.
4. discuter de la supériorité de  $EQD(f)$  vs  $FTM(f)$  seule pour évaluer la capacité de distinguer des détails dans une image.

## 7.2 Transformée de Fourier-Bessel (-Hankel) et l'algorithme $\epsilon$

La transformée de Hankel est une intégrale qui apparaît souvent dans le calcul des amplitudes de diffusion en physique atomique et nucléaire. La transformée de Hankel  $H_n(p; g)$  d'une fonction  $g$  est définie comme

$$H_n(p; g) = \int_0^\infty x g(x) J_n(px) dx \quad (7.4)$$

où les fonctions de Bessel  $J_n(px)$  satisfont la relation de fermeture

$$\int_0^\infty x J_n(px) J_n(p'x) dx = \frac{1}{p} \delta(p - p'). \quad (7.5)$$

À cause de la nature oscillatoire des fonctions de Bessel, l'intégrale (7.4) est souvent difficile à évaluer directement. On note que cette intégrale peut être considérée comme un prototype d'intégrales à intégrandes oscillantes.

i. On suggère la stratégie suivante pour une évaluation précise (et exacte!) de  $H_n(p; g)$ . On réécrit (7.4) comme

$$H_n(p; g) = \sum_{l=0}^{\infty} \int_{j_{n,l}}^{j_{n,l+1}} f(x) J_n(x) dx \equiv \sum_{l=0}^{\infty} I_{n,l} \quad (7.6)$$

où  $\{j_{n,l}\}$  sont les zéros de  $J_n(x)$  et  $f(x) = xg(x/p)/p^2$ . Maintenant les intégrales  $I_{n,l}$  peuvent être évaluées aisément par les méthodes usuelles. La série (7.6) est par contre une série alternante et la somme doit être évaluée avec une certaine attention. Il existe une technique, l'*algorithme- $\epsilon$* , qui est utile dans ce contexte et particulièrement efficace lorsque la fonction  $g(x)$  est relativement *douce* et décroissante monotoniquement. Qualitativement, l'algorithme en question transforme une série à convergence lente en une autre série à convergence accélérée.

**i.** Codez l'algorithme  $\epsilon$  et testez votre programme sur les séries suivantes

$$\pi = 4 - \frac{4}{3} + \frac{4}{5} - \frac{4}{7} + \dots \quad (\text{suite de Leibniz}) \quad (7.7)$$

$$\ln 3 = 2 - 2 + \frac{8}{3} - 4 + \dots \quad (7.8)$$

**ii.** Appliquez l'algorithme  $\epsilon$  au calcul de la transformée de Hankel pour différentes valeurs de  $p$  et différentes fonctions  $g(x)$ .

# Chapitre 8

## Interpolation, extrapolation et approximation

### 8.1 Interpolation au moyen de splines

Il existe plusieurs méthodes d'interpolation que l'on peut classer librement comme *interpolation polynomiale*, *interpolation par fonctions rationnelles*, *interpolation trigonométrique* et *interpolation par fonctions splines*. Cette dernière méthode appartient à une classe spéciale d'interpolation au moyen de polynômes continus par morceaux (*piecewise continuous polynomials*).

L'objet de ce projet sera d'examiner la théorie et les applications de l'interpolation par fonctions splines.

- i. Présentez d'abord la théorie et la classification des fonctions splines (ou simplement splines).
- ii. Examinez les propriétés de convergence de l'interpolation par fonctions splines.
- iii. Comparez les performances des *splines cubiques*, *B-splines*, et des *splines exponentielles*.

iv. Parmi les nombreuses applications possibles, montrez l'utilité des splines dans le contexte de l'intégration numérique (quadrature).

## 8.2 Approximation au moyen de fonctions rationnelles : approximants de Padé

Sous le thème d'approximation par fonction rationnelle, nous allons nous concentrer sur une certaine classe d'approximations connue sous le nom d'*approximants de Padé*. Soit la représentation en série de puissance de la fonction  $f(z)$

$$f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i. \quad (8.1)$$

Un approximant de Padé de  $f(z)$  est une fonction rationnelle (rapport de deux polynômes)

$$\{L, M\} = \frac{a_0 + a_1 z^1 + \dots + a_L z^L}{b_0 + b_1 z^1 + \dots + b_M z^M} = \frac{P_L(z)}{Q_M(z)} \quad (8.2)$$

dont le développement de Maclaurin doit être en accord avec (8.1) jusqu'à l'ordre  $\mathcal{O}(z^{L+M+1})$ , i.e.

$$\sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i = \frac{a_0 + a_1 z^1 + \dots + a_L z^L}{b_0 + b_1 z^1 + \dots + b_M z^M} + \mathcal{O}(z^{L+M+1}). \quad (8.3)$$

Le calcul des approximants se réduit ainsi à la solution d'un système d'équations linéaire pour nous donner les coefficients  $\{a_i\}$  et  $\{b_j\}$  en fonction des coefficients connus  $\{c_k\}$ .

i. Solutionnez le système (8.3) et démontrez la performance des approximants obtenus pour la fonction

$$f(z) = \sqrt{\frac{1+z/2}{1+2z}} = 1 - \frac{3}{4}z + \frac{39}{32}z^2 - \frac{267}{128}z^3 + \dots \quad (8.4)$$

à différentes valeurs de  $z$ .

**ii.** Comparez les approximants de Padé des trois fonctions suivantes

$$f_1(z) = \exp(z) \quad , \quad f_2(z) = \tan z \quad , \quad f_3(z) = \ln(1+z) \quad (8.5)$$

aux résultats obtenus par une somme terme à terme de la série de Taylor correspondante. On dira que les approximants de Padé sont le *pendant numérique du prolongement analytique*, commentez à l'aide de l'expérience acquise.



# Chapitre 9

## Méthodes stochastiques

### 9.1 Mouvement brownien et agrégation par diffusion limitée

i. Le *mouvement brownien* réfère au déplacement d'une particule mésoscopique dans un gaz soumise aux collisions aléatoires de molécules constituant ce gaz. L'objet de ce projet est de construire une simulation pour examiner le déplacement d'une telle particule. La particule est confinée sur un réseau 2D de  $L \times L$  carrés de sorte que la position de la particule puisse se représenter par les deux entiers  $i, j = 0 \dots L - 1$ . La particule débute au centre la grille. À chaque étape de la simulation, on choisit une direction aléatoire – vers le haut, le bas, la droite, ou la gauche – et la particule se déplace dans la direction choisie. Le processus s'appelle une *marche aléatoire*. On interdit à la particule de quitter la grille – si une telle situation se présentait, il s'agit de refuser le pas et de choisir une autre direction.

Écrivez un programme qui complétera un nombre  $N \gg 1$  de pas sur la grille avec disons  $L = 101$  et produisez une animation de la position de la particule. Vous choisirez  $L$  impair pour avoir un point du réseau exactement au centre. Quantifiez ce mouvement brownien en calculant pour plusieurs réalisations du processus la distance moyenne parcourue, et l'écart-type de cette distance. Quelles conclusions pouvez-vous tirer de vos expériences numériques ?

**ii.** *L'agrégation par diffusion limitée (diffusion-limited agregation, DLA)* : fier des résultats obtenus en **i.**, vous allez maintenant examiner un des modèles les plus célèbres de la physique numérique, la DLA, proposée en 1981 par Leonard Sander. Il existe plusieurs versions du processus DLA, celle que vous examinerez se résume ainsi. Vous prenez un réseau carré avec une particule en son centre. La première particule fera une marche aléatoire qui se terminera à la surface du réseau où elle y restera attachée et immobile pour le reste du processus. Une seconde particule partira du centre et s'arrêtera lorsqu'elle aura, soit atteint un des côtés du carré, soit rejoint l'autre particule. Et ainsi de suite pour les particules suivantes.

Modifiez votre programme de marche aléatoire et illustrez le processus DLA sur une grille 101 x 101. Arrêtez le processus lorsque le centre de votre grille contiendra une particule. La visualisation sera d'autant plus impressionnante si vous augmentez la grosseur de la grille au prix d'un calcul plus long. Une modification intéressante est de coder en couleur vos particules en fonction de leur âge. Après exploration, vous serez réjoui par l'apparition de structures fractales, parfois appelés *arbres browniens*.

**iii.** La version originale de DLA est sensiblement différente de ce que vous venez d'accomplir en **ii.** et aussi plus difficile à compléter en un temps ... fini. Dans la version originale, une particule est ancrée au centre de la grille et une nouvelle particule part du périmètre et s'arrête lorsqu'elle atteint la particule placée au centre. Puis une autre particule démarre d'une position aléatoire sur le périmètre et s'arrête lorsqu'elle aura atteint une des deux premières particules. Ici aussi on interdit la perte de particules hors du carré. Malheureusement, la simulation de cette version de DLA est très lente car nos marcheurs aléatoires prennent un temps considérable à atteindre le centre, et c'est d'autant plus vrai au début de la simulation. Une simple observation nous permettra d'accélérer les choses.

Lors de son déplacement aléatoire vers le centre, une particule traversera un cercle autour de l'origine à un point quelconque - aucun point de ce cercle n'est particulier de sorte que la particule traversera le cercle en un point quelconque. Mais nous n'avons pas à subir la longue attente nécessaire pour que la particule traverse ce cercle en route vers le centre. On peut couper court à ces excursions et démarrer la particule sur un point quelconque du cercle au lieu du périmètre de la grille. La procédure suivra ainsi la prescription approximative suivante<sup>1</sup> :

---

1. Certains détails sont évidemment laissés à votre discrétion. Par exemple, où placer

1. Débuter avec une particule ancrée au centre de la grille. Définir une variable  $r$ , distance à l'origine, qui contiendra la plus grande distance qu'une particule ancrée occupera. Initialement  $r = 0$ .
2. Pour chaque particule additionnelle, lancer celle-ci d'un point arbitraire sur un cercle centré à l'origine et de rayon  $r + 1$ .
3. Continuer la marche aléatoire jusqu'à ce que la particule s'agrège à une autre. Si la particule atteint la distance  $2r$ , faites disparaître cette délinquante, et relancer une particule en un autre point du cercle du rayon actuel.
4. Chaque fois qu'une particule s'agrège à une des particules précédentes, calculer sa distance  $R$  à l'origine et si cette distance est supérieure à la valeur actuelle de  $r$ , remplacer  $r$  par  $R$ .
5. Le programme devra s'arrêter si la distance  $r$  dépasse environ la moitié de la distance du centre aux frontières de la grille.

Explorez et observez ... Ces observations devront nous être présentées afin que nous apprécions les résultats de ces explorations.

---

la nouvelle particule si le point choisi sur le cercle ne tombe pas exactement sur un point de la grille cartésienne.