

# Energies - Stage

Clément Lotteau

May 2020

# 1 Splines

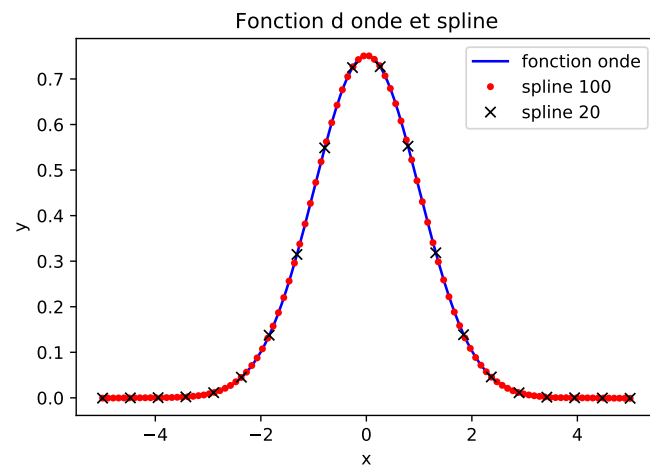


FIGURE 1 – 200x200 neurones, 100 epochs, 50 batch

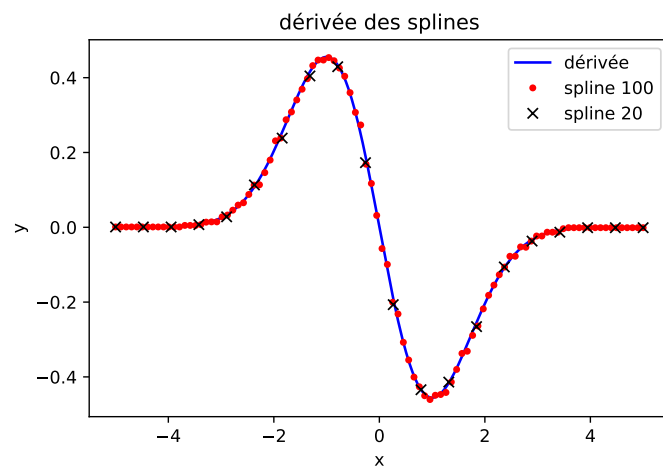


FIGURE 2 – 200x200 neurones, 100 epochs, 50 batch

## 2 Nouvelle intégrale

$$\begin{aligned}
 & \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x) \\
 & \psi(x) \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E |\psi|^2 \\
 & \frac{-\hbar^2}{2m} \psi(x) \psi''(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 |\psi|^2 = E |\psi|^2
 \end{aligned} \tag{1}$$

Intégrale par partie :

$$\int_a^b \psi(x) \psi''(x) dx = [\psi \psi']_a^b - \int_a^b |\psi'|^2 dx \tag{2}$$

Ainsi :

$$E = \frac{\frac{-\hbar^2}{2m} ([\psi \psi']_a^b - \int_a^b |\psi'|^2 dx) + \frac{1}{2} m \omega^2 \int_a^b x^2 |\psi|^2 dx}{\int_a^b |\psi|^2 dx} \tag{3}$$

Pour la solution analytique, on intègre de  $-\infty$  à  $+\infty$  et, avec la fonction d'onde de l'état fondamental  $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$ , on obtient :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1 \tag{4}$$

$$E_c = \frac{-\hbar^2}{2m} ([\psi \psi']_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2 dx) = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2 dx \tag{5}$$

$$E_p = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi|^2 dx$$

En calculant ces intégrales :

$$\begin{aligned}
 E_c &= \frac{\hbar\omega}{4} \\
 E_p &= \frac{\hbar\omega}{4} \\
 E_{totale} &= \frac{\hbar\omega}{2}
 \end{aligned} \tag{6}$$

### 3 Energie totale

$m$ ,  $\omega$  et  $\hbar$  sont fixés à 1.

$$E = \frac{\frac{-1}{2} \left( [\psi\psi']_{-5}^{+5} - \int_{-5}^{+5} |\psi'|^2 dx \right) + \frac{1}{2} \int_{-5}^{+5} x^2 |\psi|^2 dx}{\int_{-5}^{+5} |\psi|^2 dx} \quad (7)$$

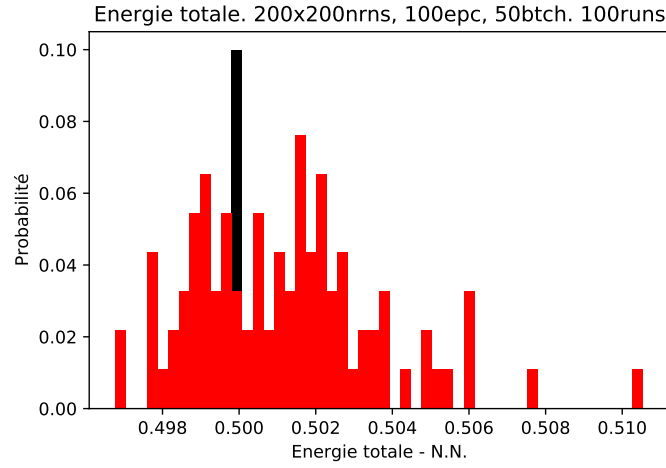


FIGURE 3 – En noir : valeur de la fonction d’onde d’origine. Sa probabilité n’est pas significative.

Valeur analytique : 0.5  
Valeur à approcher : 0.5000

**N.N. :**  
Moyenne : 0.5012  
Ecart-type : 0.0024  
Max : 0.5105  
Min : 0.4968

## 4 Energie potentielle

$$E_p = \frac{\frac{1}{2} \int_{-5}^{+5} x^2 |\psi|^2 dx}{\int_{-5}^{+5} |\psi|^2 dx} \quad (8)$$

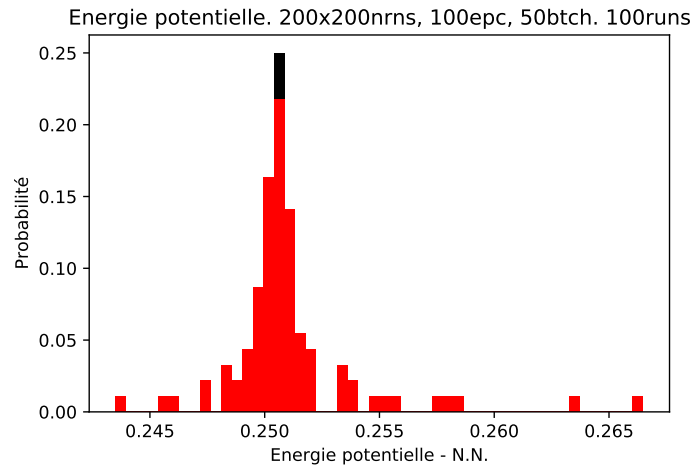


FIGURE 4 – En noir : valeur de la fonction d’onde d’origine. Sa probabilité n’est pas significative.

Valeur analytique : 0.25  
 Valeur à approcher : 0.2505

**N.N. :**  
 Moyenne : 0.2511  
 Ecart-type : 0.0030  
 Max : 0.2665  
 Min : 0.2435

## 5 Energie cinétique

$$\frac{\frac{1}{2}([\psi\psi']_{-5}^{+5} - \int_{-5}^{+5} |\psi'|^2 dx)}{\int_{-5}^{+5} |\psi|^2 dx} \quad (9)$$

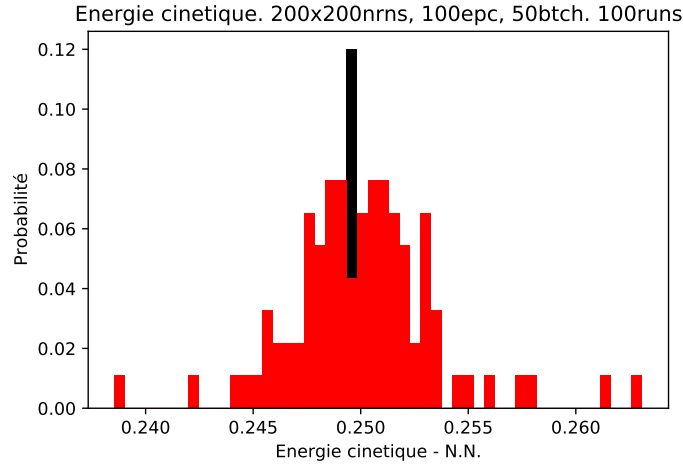


FIGURE 5 – En noir : valeur de la fonction d’onde d’origine. Sa probabilité n’est pas significative.

Valeur analytique : 0.25  
Valeur à approcher : 0.2495

**N.N. :**  
Moyenne : 0.2501  
Ecart-type : 0.0035  
Max : 0.2631  
Min : 0.2386

## 6 Probabilité de présence

$$Proba = \int_{-5}^{+5} |\psi|^2 dx \quad (10)$$

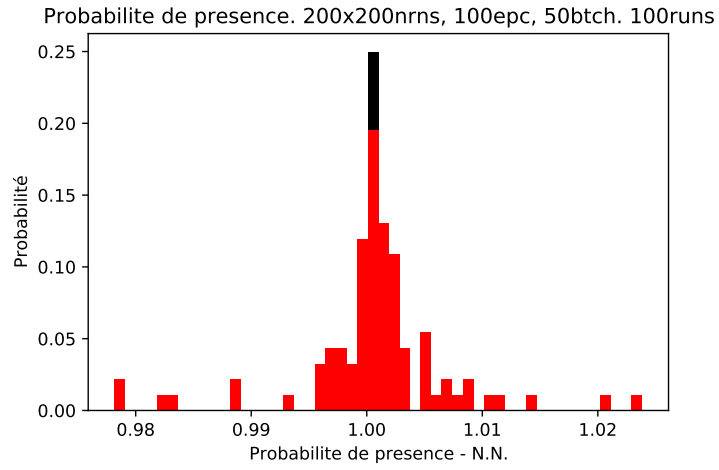


FIGURE 6 – En noir : valeur de la fonction d’onde d’origine. Sa probabilité n’est pas significative.

Valeur analytique : 1  
 Valeur à approcher : 1.0010

**N.N. :**  
 Moyenne : 1.0007  
 Ecart-type : 0.0065  
 Max : 1.0238  
 Min : 0.9782

## 7 Convergence

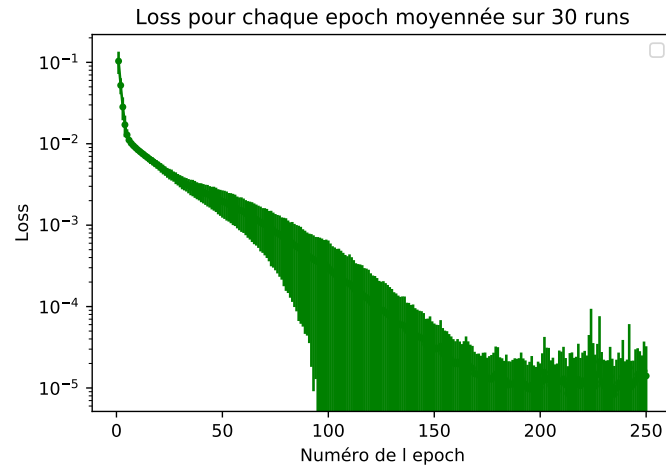


FIGURE 7 – Loss a chaque epoch moyenné sur 30 runs. Barres d'erreur avec l'écart-type des loss pour chaque numéro d'epochs. NN : 200 neurones, 50 batch-size.

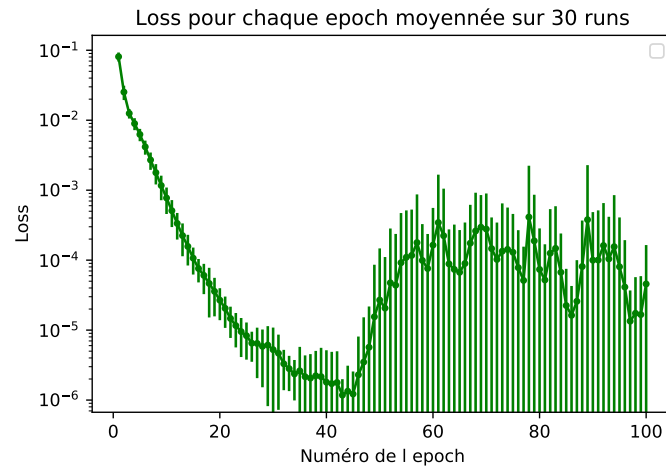


FIGURE 8 – Même chose. NN : 200x200 neurones, 50 batchsize.



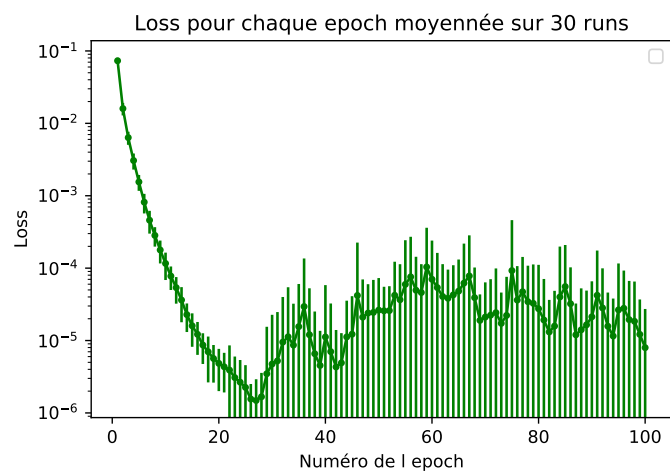


FIGURE 9 – Même chose. NN : 200x200x200 neurones, 50 batchsize.

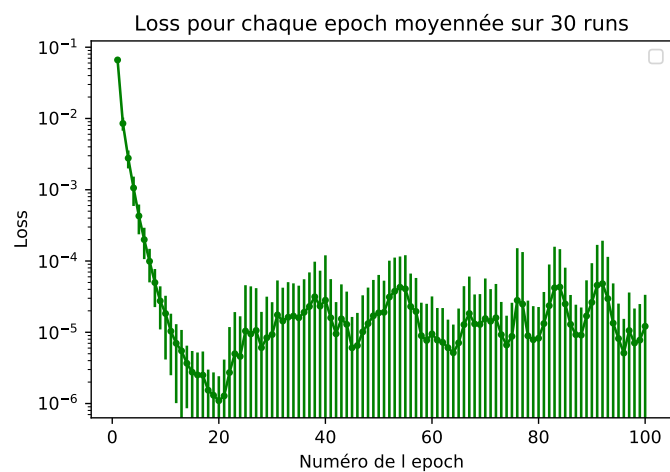


FIGURE 10 – Même chose. NN : 200x200x200x200 neurones, 50 batchsize.

## 8 Energie convergée

Ici j'utilise un réseau 200x200 avec 44 epochs et 50 de batchsize. Les écarts au delà de  $10^{-2}$  entre la courbe et l'approximation sont exclus.

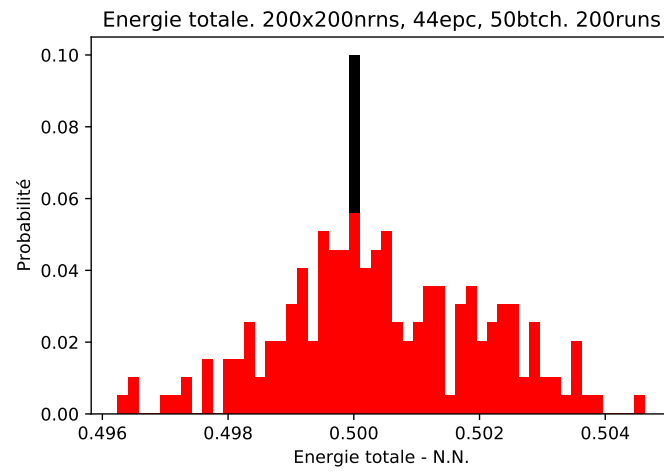


FIGURE 11 –

Moyenne : 0.5005  
Ecart-type : 0.0016  
Max : 0.5046  
Min : 0.4962

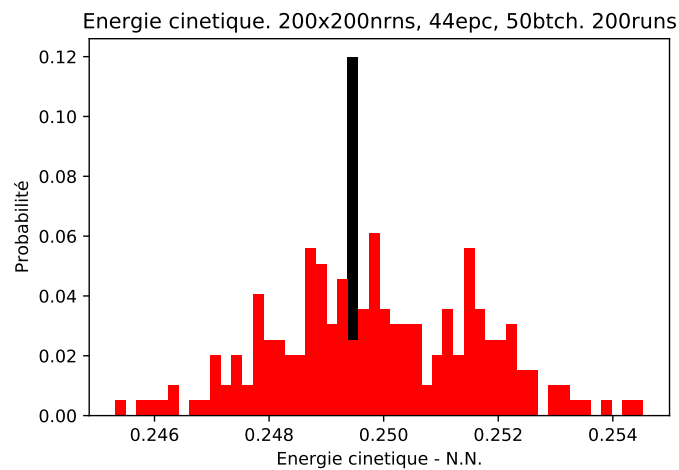


FIGURE 12 –

Moyenne : 0.2506  
 Ecart-type : 0.0007  
 Max : 0.2527  
 Min : 0.2483

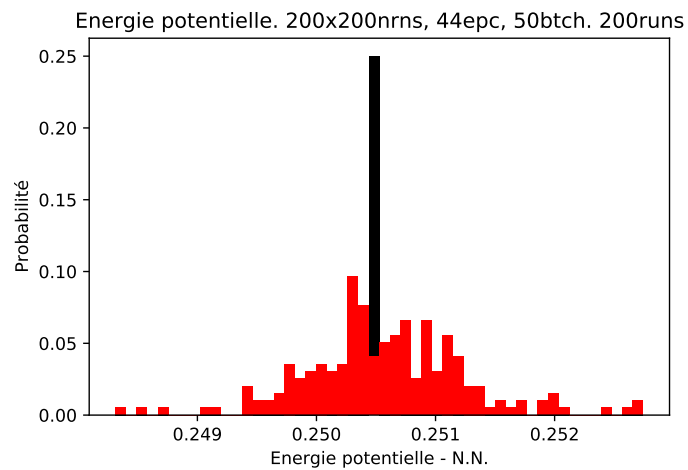


FIGURE 13 –

Moyenne : 0.2499  
 Ecart-type : 0.0018  
 Max : 0.2545

Min : 0.2453

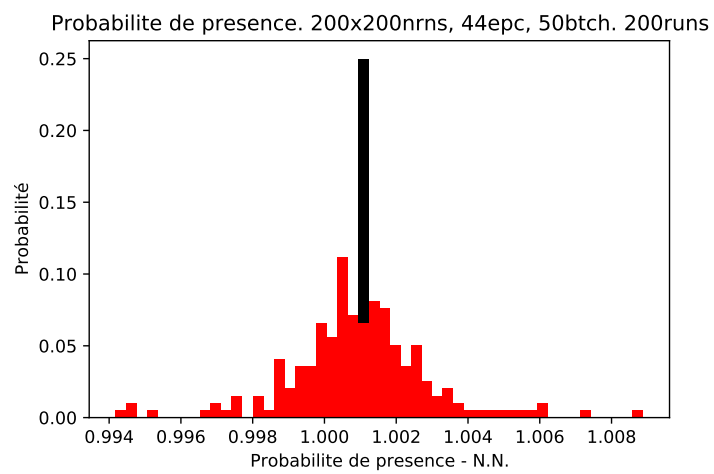


FIGURE 14 –

Moyenne : 1.0009  
Ecart-type : 0.0020  
Max : 1.0089  
Min : 0.9942

## 9 Convergence de l'énergie

### 9.1 Proba de présence

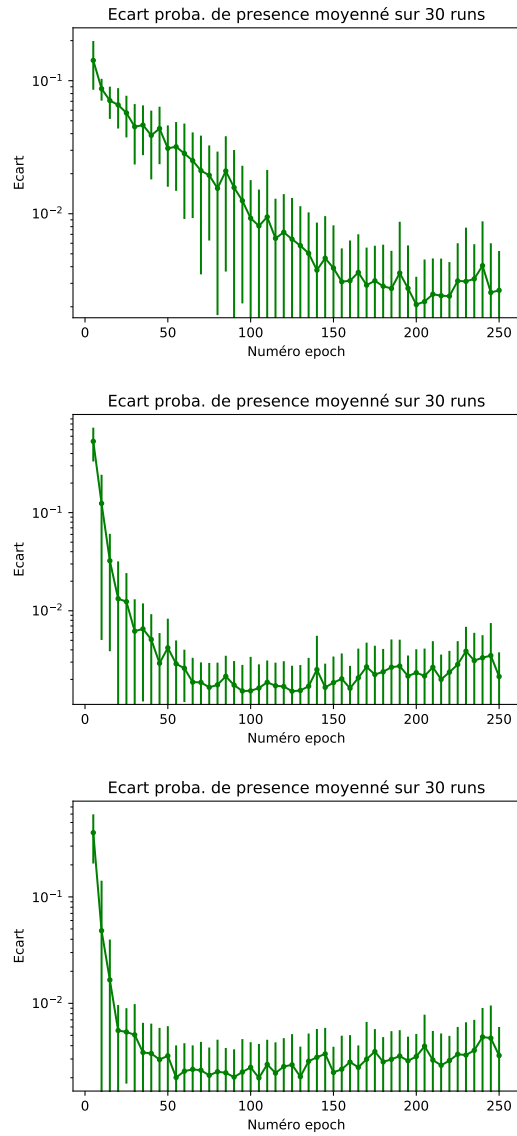


FIGURE 15 – Réseaux : 1 couche, 207 neurones, 622 params. 2 couches, 22x24 neurones, 621 params. 3 couches 16x17x16 neurones, 626 paramètres.

## 9.2 Energie totale

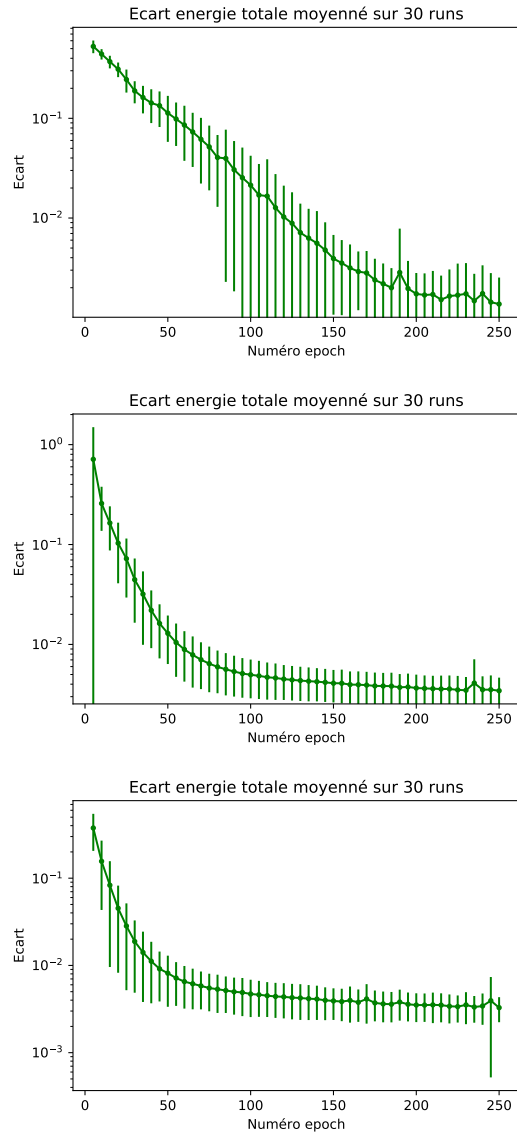


FIGURE 16 – Réseaux : 1 couche, 207 neurones, 622 params. 2 couches, 22x24 neurones, 621 params. 3 couches 16x17x16 neurones, 626 paramètres.

### 9.3 Energie potentielle

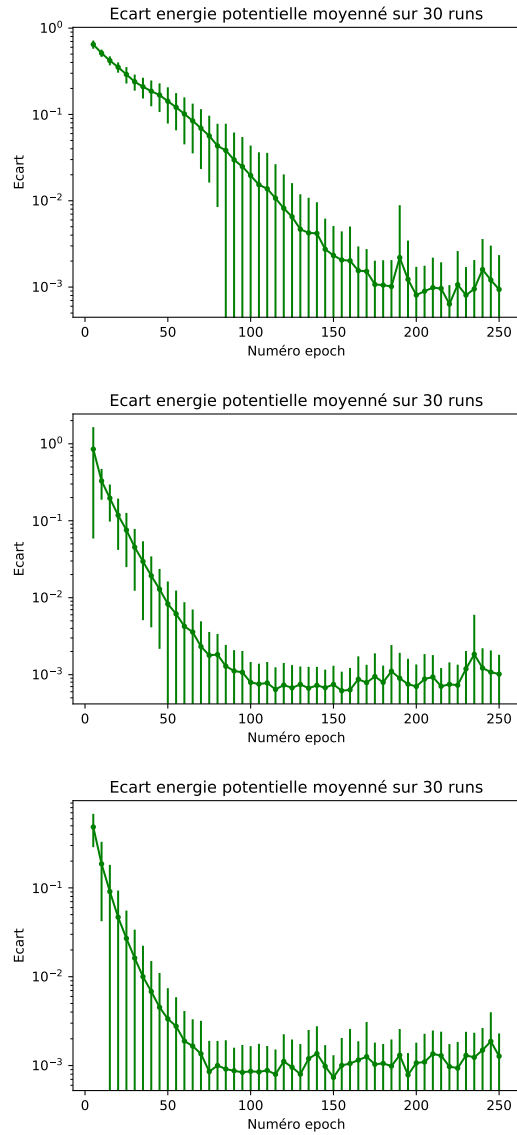


FIGURE 17 – Réseaux : 1 couche, 207 neurones, 622 params. 2 couches, 22x24 neurones, 621 params. 3 couches 16x17x16 neurones, 626 paramètres.



## 9.4 Energie cinétique

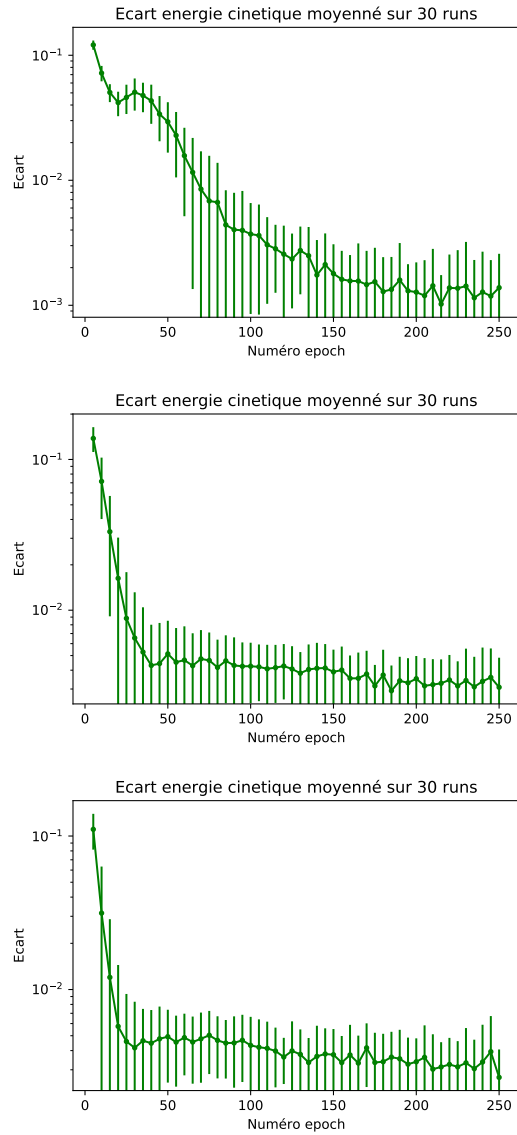


FIGURE 18 – Réseaux : 1 couche, 207 neurones, 622 params. 2 couches, 22x24 neurones, 621 params. 3 couches 16x17x16 neurones, 626 paramètres.

## 9.5 Convergence du réseau 200x200

