

Energies - Stage

Clément Lotteau

May 2020

1 Splines

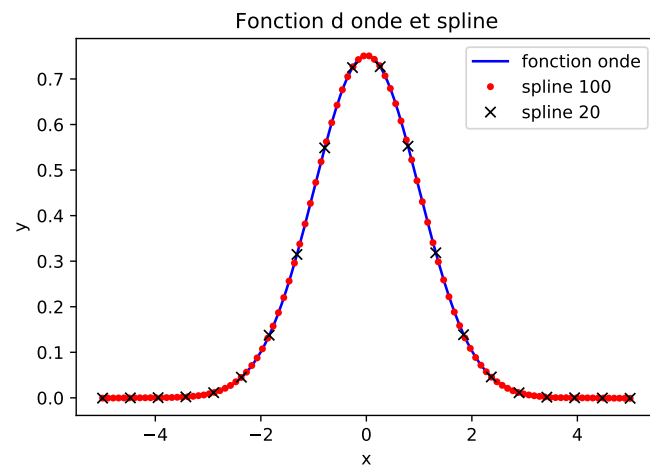


FIGURE 1 – 200x200 neurones, 100 epochs, 50 batch

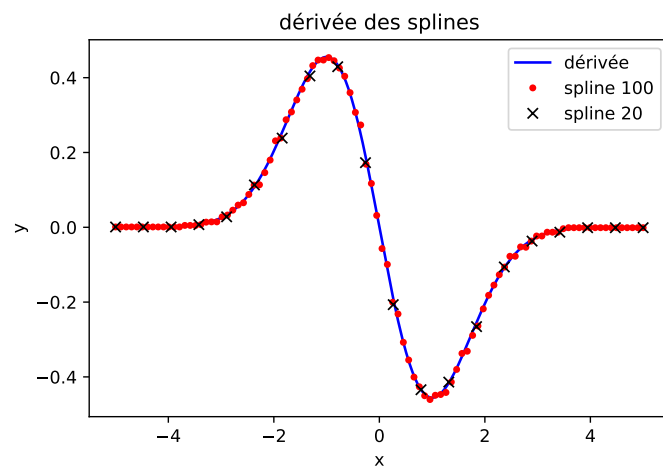


FIGURE 2 – 200x200 neurones, 100 epochs, 50 batch

2 Nouvelle intégrale

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

Intégrale par partie :

$$\begin{aligned}
\int_a^b (\psi \psi'' + |\psi'|^2) dx &= [\psi \psi']_a^b - \int_a^b |\psi'|^2 dx + \int_a^b |\psi'|^2 dx \\
&= [\psi \psi']_a^b
\end{aligned} \tag{2}$$

Ainsi :

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

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 :

$$\begin{aligned}
E_{analytique} &= \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi|^2 dx \\
E_{analytique} &= \frac{1}{4} \hbar \omega
\end{aligned} \tag{4}$$

m , \hbar et ω sont ici fixés à 1.

2.1 Energie totale

$$E = \frac{\frac{-\hbar}{m} [\psi\psi']_a^b + \frac{1}{2}m\omega^2 \int_a^b x^2 |\psi|^2 dx}{\int_a^b |\psi|^2 dx} \quad (5)$$

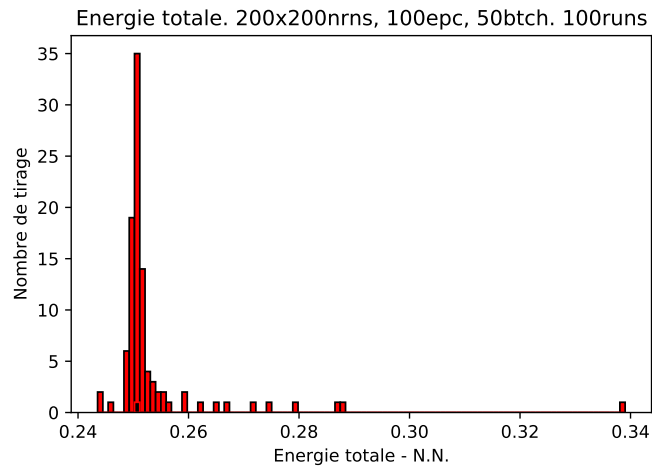


FIGURE 3 – En noir : valeur de la fonction d’onde d’origine

Valeur analytique : 0.25

Valeur à approcher : 0.251

N.N :

Moyenne : 0.254

Ecart-type : 0.011

Max : 0.339

Min : 0.244

2.2 Energie potentielle

$$\frac{1}{2}m\omega^2 \int_a^b x^2 |\psi|^2 dx \quad (6)$$

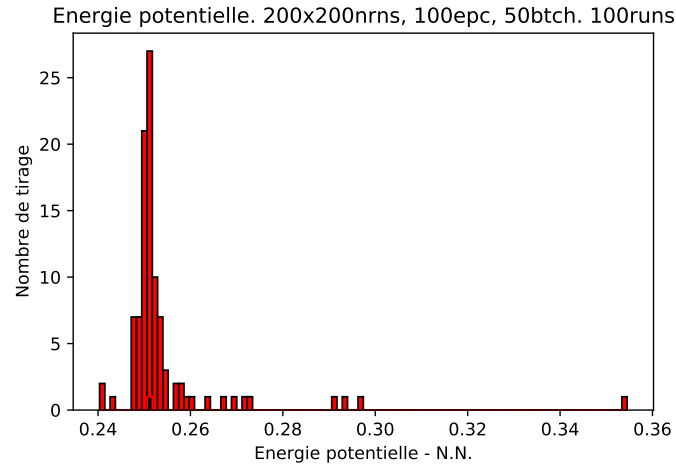


FIGURE 4 – En noir : valeur de la fonction d’onde d’origine

Valeur analytique : 0.25

Valeur à approcher : 0.251

N.N :

Moyenne : 0.254

Ecart-type : 0.013

Max : 0.355

Min : 0.240

2.3 Energie cinétique

$$\frac{-\hbar}{m} [\psi \psi']_a^b \quad (7)$$

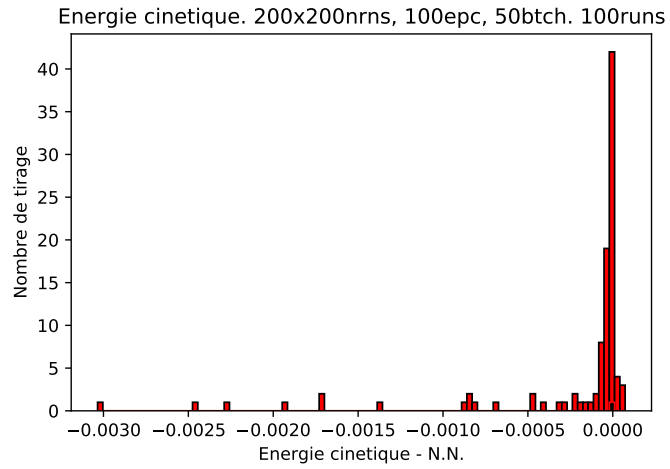


FIGURE 5 – En noir : valeur de la fonction d’onde d’origine

Valeur analytique : 0

Valeur à approcher : 0

N.N :

Moyenne : -0.00023

Ecart-type : 0.00056

Max : 0.00007

Min : -0.00303

2.4 Probabilité de présence

$$\int_a^b |\psi|^2 dx \quad (8)$$

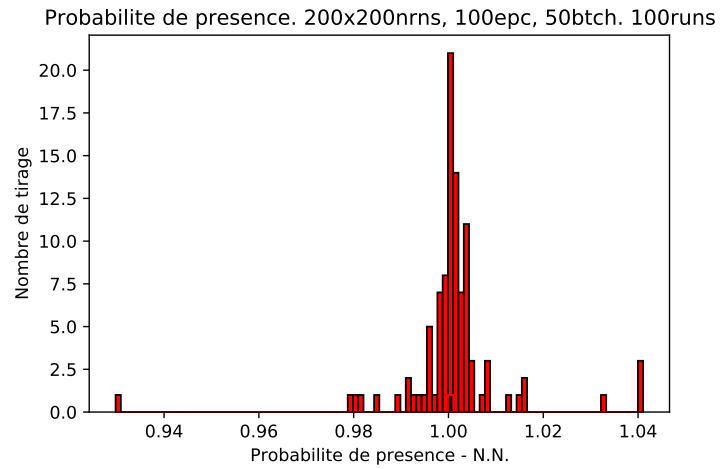


FIGURE 6 – En noir : valeur de la fonction d’onde d’origine

Valeur analytique : 1

Valeur à approcher : 1.001

N.N :

Moyenne : 1.001

Ecart-type : 0.012

Max : 1.041

Min : 0.930