

Exercices de Révision

1. Equations Elliptiques

– Soit la fonctionnelle

$$S = \int dx \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 - \frac{\beta}{4} (\Phi(x)^2 - 1)^2 \right]$$

Par une intégration par parties écrire cette expression sous la forme

$$S = \int dx \left[\frac{1}{2} \Phi(x) \mathbf{M} \Phi(x) + V(\Phi(x)) \right]$$

avec \mathbf{M} un opérateur à expliciter et déduire l'équation d'extrémisation, $\delta S = 0$ sous la forme

$$\mathbf{M} \Phi + V'(\Phi) = 0$$

Discuter les différentes formes obtenues, selon que l'on discrétise S d'abord, où que l'on discrétise cette équation.

2. Equations Paraboliques

– Soit l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2}$$

On exprime $\Phi(z, t)$ en termes des fonctions propres et l'on obtient l'équation

$$E\psi_E(z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_E''(z)$$

On travaille désormais dans des unités telles que $\hbar = 1$ et $m = 1/2$. La discrétisation conventionnelle conduit à la récurrence

$$\psi_{E,n+1} + \psi_{E,n-1} = (2 - E)\psi_{E,n}$$

pour $n = 0, 1, \dots, N$, si l'on travaille sur un intervalle de taille $L = N \times a$. On cherche à résoudre cette équation, en imposant les conditions aux bords, $\psi_{E,0} = 0$ et $\psi_{E,N} = 0$. Dans ce cas, on a, bien sûr, un problème de valeurs propres (les valeurs possibles de E , pour lesquelles on a une solution non-nulle). Au lieu de diagonaliser la matrice résultante

$(N-2) \times (N-2)$, on va employer l'astuce suivante : on va écrire la récurrence sous la forme

$$\begin{pmatrix} \psi_{E,n+1} \\ \psi_{E,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2-E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{E,n} \\ \psi_{E,n-1} \end{pmatrix}$$

On note que, dans ce cas, les éléments de la matrice 2×2 ne dépendent pas de la position et l'on peut résoudre cette récurrence, imposer les conditions aux bords et arriver à l'équation suivante

$$\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N = 1$$

En déduire les valeurs possibles pour E et les comparer avec la solution exacte.

3. Equations Hyperboliques

– Soit l'équation

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - v^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - m^2 \Phi$$

On veut la résoudre numériquement par la méthode Runge-Kutta d'ordre 4. En introduisant la vitesse, $\Psi = \partial \Phi / \partial t$ on peut la transformer en un système de deux équations du premier ordre couplées. Si l'on appelle le pas temporel a_t , $t = p \times a_t$ et le pas spatial a_z , $z = q \times a_z$, trouver la relation entre a_z et a_t pour que la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 soit stable.

Discuter l'influence du terme proportionnel à m^2 dans la relation entre les pas.