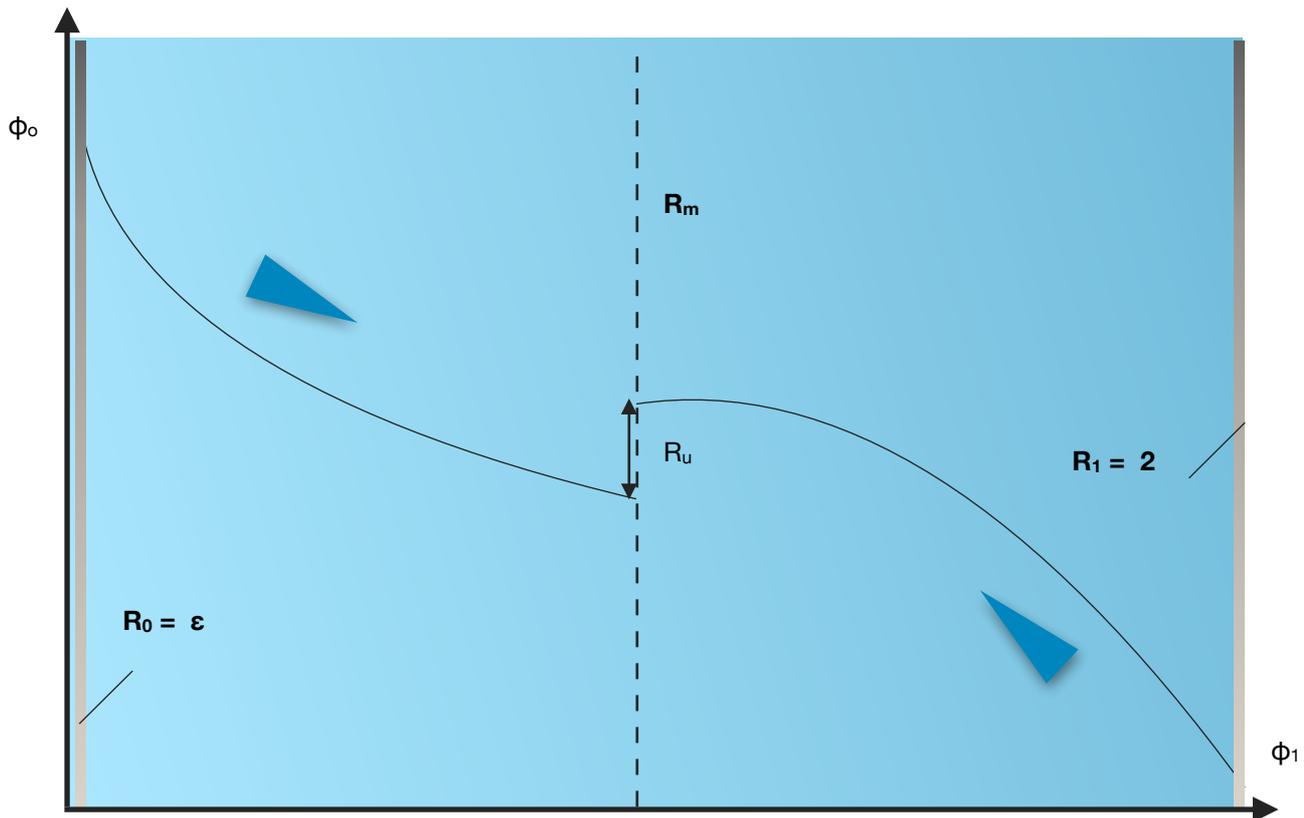


Projet Schrödinger : notes explicatives



Les équations

Le laplacien d'une fonction ϕ d'une variable libre r (coordonnée sphérique) peut se ramener à l'équation différentielle suivante (pour la partie radiale d'une décomposition en harmoniques sphériques) :

$$\text{Eq. (1)} \quad \frac{d^2}{dr^2} \phi(r) - l(l+1) \frac{\phi(r)}{r^2} = 0$$

ou encore comme un système de deux équations du premier ordre :

$$\text{Eq. (2)} \quad \frac{d}{dr} \phi(r) \equiv \Psi(r) ; \quad \frac{d}{dr} \Psi(r) = l(l+1) \frac{\phi(r)}{r^2}$$

où l est généralement un nombre entier positif ou nul ; ici nous le traiterons comme un nombre réel. Pour résoudre les équations (2) il faut contraindre les deux fonctions ϕ , Ψ aux limites R_0 et R_1 .

Or, les équations sont singulières en $r = 0$: il faut donc étudier les limites analytiques aux petites et grandes valeurs de r pour comprendre le comportement numérique de l'intégration. L'équation homogène (1) admet deux solutions générales

$$\phi(r) = \phi_0 r^{-l} \quad \text{et} \quad \phi(r) = \phi_0 r^{l+1}$$

qui sont l'une croissante avec $r \gg 1$, l'autre divergente avec $r \rightarrow 0$. Les erreurs numériques (troncature, arrondi, algorithmique, ..) peuvent croître rapidement si nous intégrons de l'origine vers de grandes valeurs de r en un trait.

L'approche numérique détaillée sur la figure consistera à découper le domaine d'intégration en deux morceaux, définir les nouvelles conditions aux limites (ici en R_0 et R_1) puis intégrer les courbes en sens opposés afin qu'elle se rejoignent en un point intermédiaire (ici R_m).

La méthode « arbalète » ou *tir ciblé*

On résout les équations (2) en fixant la valeur de $\phi(\epsilon)$ mais en laissant libre la valeur de $\Psi(\epsilon)$; en $r = R_1$, on fixera maintenant $\Psi(R_1)$ tout en laissant libre la valeur de $\phi(R_1)$.

Un simple schéma eulérien d'ordre 1 est mis en œuvre pour intégrer depuis l'une ou l'autre limite.

Après avoir fixé les contraintes et des valeurs d'essai pour tous les paramètres, les quatre courbes intégrées vont se croiser en $r = R_m$; il est maintenant possible de définir un vecteur des différences, \mathbf{R} , par exemple

$$\text{Eq. (3)} \quad \mathbf{R} \equiv (\Phi_{>} - \Phi_{<}, \Psi_{>} - \Psi_{<})_{r=R_m}$$

avec le signe « > » pour indiquer l'intégration de l'origine, vers l'extérieur, et « < » pour celle qui est lancée depuis le bord extérieur (ici $r = 2$). Les quatre quantités sont des fonctions implicites des deux paramètres libres $(\Psi[\epsilon], \phi[R_1]) = (\Psi_\epsilon, \phi_1)$. On cherche alors à modifier le vecteur \mathbf{R} pour obtenir une solution continue en $r = R_m$. Le scalaire R_u mesure l'erreur nette comme la norme au carré du vecteur \mathbf{R} :

$$\text{Eq. (4)} \quad R_\mu \equiv \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R}$$

La méthode de Newton-Raphson pourrait s'appliquer ici dans la construction de la matrice des variances, \mathbf{J} , qui permet de calculer les nouvelles valeurs de $(\Psi_\epsilon, \phi_1) \rightarrow (\Psi_\epsilon + \delta\Psi_\epsilon, \phi_1 + \delta\phi_1)$. En calculant par différences finies les variances \mathbf{J} :

$$\text{Eq. (5)} \quad \mathbf{J} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial R[0]}{\partial \Psi_\epsilon} & \frac{\partial R[0]}{\partial \phi_i} \\ \frac{\partial R[1]}{\partial \Psi_\epsilon} & \frac{\partial R[1]}{\partial \phi_i} \end{pmatrix}$$

nous pouvons ensuite recherche les nouvelles valeurs des paramètres libres tels que l'erreur R_u calculée en (4) sera = 0. Mathématiquement, nous recherchons la solution approchée

$$R_\mu(\Psi_\epsilon + \delta\Psi_\epsilon, \phi_1 + \delta\phi_1) = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R}(\Psi_\epsilon, \phi_1) + 2\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{J} \cdot \begin{bmatrix} \delta\Psi_\epsilon \\ \delta\phi_1 \end{bmatrix} = 0$$

ce qui mène à la solution :

$$\begin{bmatrix} \delta\Psi_\epsilon \\ \delta\phi_1 \end{bmatrix} = -\frac{1}{2}\mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{R}(\Psi_\epsilon, \phi_1)$$

Les corrections apportées aux paramètres libres devraient amener une convergence vers $R_u = 0$ et une courbe continue est ainsi obtenue.

Le code laplace.cc

Dans sa forme actuelle le programme suit assez fidèlement le programme de recherche de solution donné ici. La solution approché mise en place repose sur la solution divergent en $r = 0$. Les valeurs du multipôle l : $[1/4, 7/4]$ ont toutes données des résultats adéquats, toutefois le fait d'utiliser les variables linéairement (fonction, rayon r) plutôt que des échelles logarithmiques limite fortement le domaine d'application du code dans son état actuel (pour ce qui est du problème traité et la valeur de l en particulier). Ces limitations devraient être minorées pour le projet Schrödinger parce que celui-ci ne fait pas apparaître de singularité (une discontinuité pour l'un des cas traité certes).

Le fichier `matprod.h` contient des définitions de fonctions utilisé par le code, par contre les E/S se font par des flux standard de la classe `fstream`. Il vous est donc possible de compiler ce code et de l'éditer pour vous faire une idée de l'application de la méthode de tir pour ce problème aux conditions limites de Dirichlet.

La compilation du code se fait sans option particulière avec `g++` (aucune édition de liens).

Les documents sont tous joints @ l'archive `arbalete.tar`.

cmb novembre 2014.