



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de
la Recherche Scientifique
Université Ibn Khaldoun – Tiaret –



Faculté des Mathématiques et Informatique

Département des MATHÉMATIQUES

MEMOIRE EN VUE DE L'OBTENTION DU DIPLÔME DE MASTER

DOMAINE : Mathématiques et Informatique

FILIERE : Mathématiques

SPECIALITE: Analyse Fonctionnelle et Equations différentielle

SUJET DU MEMOIRE :

*La résolution de l'équation de Schrödinger par les
méthodes des élément finis et volume finis*

Présenté par

BOUALAM FATIMA

MORSLI HANANE

KHELIL NADIA

Devant Le Jury Composé de :

Mr :Zian Mohamed

MCA

Président

Mr : Sabit souhila

MCB

Encadreur

Mr :Zitouni Ismail

MAA

Examineur

Année Universitaire : 2019/2020

Remerciement

Avant tout, nous remercions le bon Dieu tout puissant qui nous à aider à accomplir ce travail.

Nous tiens à adresser notre sincères remerciements à notre encadreur Madame Sabit souhila qui par ses conseils, ses recommandation, se patience nous permis de réaliser ce mémoire avec un très grand plaisir.

Nos vifs remerciement monsieurs M.Zian, I.Zitouni qui ont acceptées de lire et de juger notre mémoire .

Merci pour tous les profs de département de mathématique.

*Merci pour tout ce que vous avez donné :
Le respect, là joie.*

Dédicace

Je dédie le fruit de ce travail a ceux qui j'ai de plus cher sur terre :

A

Celle qui m'a donnée l'amour et l'affection Ma mère

Celui qui m'a donnée la confiance et l'assurance Mon Père

*A ma sœur Trkíya et leur marie Mohamed et leurs petits : Inas,
Ilyas*

A mes frères : Djilali, Azzedine, Saad

A ma sœur : chaima

A mes amis notamment

*Je tiens à souligner les efforts de mes collègues qui sont
partagent ce travail avec moi*

A mes camarades de promotion mathématique

*Enfin, Je dédie ce travail à ceux qui m'ont de près ou
de loin.*

MORSLI Hanane

Dédicace

*A prés avoir remercié Dieu le tout puissant et volonté
Je dédie ce modeste travail aux être les plus chers au monde :*

*A mon très chers parents qui ont tait sacrifié pour mes
études en témoignage de leur amour, patience et qui ont fait
moi la personne qui je suis aujourd'hui*

*A mon marie : **MEBAREK Abdelmalek***

*A mes tantes : **BEKHLIFA Hadria , Fatma***

*A mes frères : **Ossama, Abderahmane***

*A mes sœur : **fatima, Halima, Doua, Hiba, Aya et Ghofran***

A tous les membres de comité local

A mes amis notamment

*Je tiens à souligner les efforts de mes collègues
qui sont partagent ce travail avec moi*

A mes camarades de promotion mathématique

Enfin, Je dédie ce travail à ceux qui m'ont de près ou de loin.

KHELIL Nadia

Dédicace

*A prés avoir remercié Dieu le tout puissant et
volonté*

*Je dédie ce modeste travail aux être les plus chers au
monde :*

*A mon très chers parents qui ont tait sacrifié pour
mes études en témoignage de leur amour, patience et
qui ont fait moi la personne qui je suis aujourd'hui
A ma sœur :MIMOUNA et leurs petits YUCEF et
YOUNES.*

*A mon frère DJILALI et leur mariée et leurs petite
HAKIMA.*

A mes frères : RABAH, MOHAMED, HMED

A mes sœur : SENIA, KHAIRA.

A la famille BOUALAM, HMAID

A mes amis SAMIRA, NOURIA.

*Je tiens à souligner les efforts de mes collègues qui sont
partagent ce travail avec moi*

A mes camarades de promotion mathématique

*Enfin, Je dédie ce travail à ceux qui m'ont de près ou
de loin.*

BOUALAM Fatima

Table des matières

Table des matières	2
1 Préliminaire	7
1.1 Quelques rappels	7
1.2 Espace de Hilbert	7
1.3 Équation différentielle ordinaire(EDO)	7
1.4 Équation aux dérivées partielles	8
1.4.1 Équation aux dérivées partielle linéaire	8
1.4.2 Équation aux dérivées partielle quasi linéaire	9
1.4.3 Équation aux dérivées partielle non linéaire	9
1.5 Équation aux dérivées partielles du premier ordre	10
1.6 Équation aux dérivées partielles du second ordre	11
1.6.1 Classification des équations aux dérivées partielles de \mathbb{R}^N .	11
1.6.2 Classification des équation aux dérivées partielles de \mathbb{R}^2 . .	13
1.7 Formule de Green	16
1.8 Théorème de Lax-Milgram :	16
2 Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et vo-	
lume finis	19
2.1 L'historique de Schrödinger	19
2.2 Éléments finis	22
2.3 Volumes finis	23

TABLE DES MATIÈRES

2.4	Principe générales de la méthode des éléments finis	23
2.5	Formulation variationnelle	25
2.6	Éléments de Lagrange	27
2.6.1	Unisolvance	27
2.6.2	Élément finis de Lagrange	27
2.7	Famille affine d'éléments finis	32
2.8	Élément fini d'Hermite	33
2.9	Lien avec les éléments finis de Lagrange	34
2.10	Exemples	34
2.11	Estimation d'erreur	35
3	Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger	37
3.1	Résoudre le problème de Schrödinger par la méthode d'élément fini :	37
3.1.1	Écriture du problème approché	41
3.1.2	Calcul des coefficients A_{ij} de la matrice A	42
3.1.3	Calcul des composantes du second membre F	46
3.2	Le problème de Schrödinger par la méthode de volume fini :	48
3.2.1	Maillage	48
3.2.2	Formulation en volumes finis	48
3.2.3	Système linéaire	50
3.3	Résolution numérique	51
	Bibliographie	60
	Table des figures	61

Introduction

La modélisation d'un problème réel utilise les lois de la physique (mécanique, thermodynamique, électromagnétisme, acoustique, etc.) et les lois sont généralement, écrites sous la forme de bilans qui se traduisent mathématiquement par des équations différentielles ordinaires ou par des équations aux dérivées partielles qui constituent une branche importante des mathématiques appliquées.

Nous avons l'habitude de classer les équations aux dérivées partielles en trois classes fondamentales : elliptique, parabolique et hyperbolique.

En mécanique quantique, l'évolution en cours de temps de l'état d'un système quantique (atome, photon) est définie par l'équation de Schrödinger, c'est une équation aux dérivées partielles parabolique, cette équation est le thème général de notre mémoire.

Ce travail est divisé en trois chapitres : dans le premier chapitre, on présente un rappel sur les équations aux dérivées partielles et les équations différentielles ordinaires, ensuite on définit l'espace de Hilbert, la formule de Green et le théorème de Lax-Milgram.

Le deuxième chapitre présente l'histoire de l'équation de Schrödinger, et les définitions des méthodes numériques : éléments finis, volumes finis.

Dans le troisième chapitre on résout notre problème avec les deux dernières méthodes en dimension 1 par suite on l'applique sur Matlab et nous avons fait une comparaison entre les deux solutions et la solution exacte.

Chapitre 1

Préliminaire

1.1 Quelques rappels

1.2 Espace de Hilbert

Définition 1.1.

Un espace de Hilbert est un espace vectoriel muni d'un produit scalaire (x,y) et qui est complet lorsqu'il est normé par norme associée à ce produit scalaire [11]

1.3 Équation différentielle ordinaire(EDO)

Définition 1.2.

On définit une équation différentielle par une relation entre une fonction inconnue $y(x)$ et ses dérivés. On peut l'écrire sous la forme suivante :

$$F(x, y, y', \dots, y^p) = 0 \tag{1.1}$$

1.4 Équation aux dérivées partielles

Définition 1.3.

On appelle équation aux dérivées partielles d'une fonction inconnue v , une relation entre le variable $v = v(y_1, \dots, y_n)$ et ses dérivées

Exemple 1.

$$F(y_1, y_2, \dots, y_n, v, \frac{\partial v}{\partial y_1}, \frac{\partial v}{\partial y_1^2}, \dots, \frac{\partial^2 v}{\partial y_1^2}, \frac{\partial^2 v}{\partial y_1 \partial y_2}, \dots, \frac{\partial^p v}{\partial y_n^p}) = 0 \quad (1.2)$$

Exemple 2.

$$\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 = 0 \quad (1.3)$$

Définition 1.4.

On appelle un ordre d'un EDP est l'ordre le plus élevée des dérivées partielles intervenant dans l'équation

Exemple 3.

$$\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = 0 \quad (1.5)$$

- L'équation (1.5) est d'ordre 2

- L'équation (1.3) est d'ordre 1

1.4.1 Équation aux dérivées partielle linéaire

Définition 1.5.

Une équation aux dérivées partielles linéaire par rapport a la fonction u et à toutes ses dérivées partielles [1, 6]

$$H(u) = f \quad (1.6)$$

Préliminaire

Définition 1.6.

On dit qu'une équation aux dérivées partielles du second ordre linéaire si la dépendance par rapport à la fonction inconnue et ses dérivées partielles est linéaire [1, 6, 5, 2]

Exemple 4.

$$\begin{aligned} a(x,y) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + 2b(x,y) \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + c(x,y) \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + d(x,y) \frac{\partial v}{\partial x} \\ + e(x,y) \frac{\partial v}{\partial y} + f(x,y)v + g(x,y) = 0 \end{aligned} \quad (1.7)$$

l'équation (1.7) est non linéaire si $g(x,y) \neq 0$

1.4.2 Équation aux dérivées partielles quasi linéaire

Définition 1.7.

Une équation aux dérivées partielles quasi-linéaire est linéaire par rapport aux dérivées partielles d'ordre le plus élevé de la fonction v

Définition 1.8. *équation aux dérivées partielles du second ordre est quasi linéaire si :*

$$\begin{aligned} a(v, \frac{\partial v}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial y}, x, y) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + 2b(v, \frac{\partial v}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial y}, x, y) \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} \\ + c(v, \frac{\partial v}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial y}, x, y) \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + f(v, x, y, \frac{\partial v}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial y}) = 0 \end{aligned} \quad (1.8)$$

où a, b, c et f sont des fonctions définies dans un ouvert de \mathbb{R}

1.4.3 Équation aux dérivées partielles non linéaire

Définition 1.9.

Équation aux dérivées partielles est complètement non linéaire si elle dépend non linéairement des ses termes d'ordre le plus élevé [7]

1.5 Équation aux dérivées partielles du premier ordre

Définition 1.10.

Une EDP d'ordre 1 est une équation fonctionnelle de la forme [7, 9, 1] :

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n, v, \frac{\partial v}{\partial x_1}, \frac{\partial v}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial v}{\partial x_n}) = 0 \quad (1.9)$$

où v est la fonction inconnue.

Définition 1.11.

Équation aux dérivées partielles du premier ordre est quasi-linéaire si F est linéaire par rapport aux dérivées partielles $(\frac{\partial v}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial v}{\partial x_n})$ et elle s'écrit

$$\sum_{i=1}^{\infty} a_i(x_1, \dots, x_n, v) \frac{\partial v}{\partial x_i} = b(x_1, \dots, x_n, v) \quad (1.10)$$

si de plus les coefficients $a_i, i = 1 \dots n$ sont indépendants de v

Exemple 5.

$$vx^2 \frac{\partial v}{\partial x} + y \frac{\partial v}{\partial y} = v^3 \quad (1.11)$$

1.6 Équation aux dérivées partielles du second ordre

Définition 1.12.

Une équation aux dérivées partielles linéaire d'ordre (≥ 2) dans un domaine $\Omega \in \mathbb{R}^N$

$$v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

une équation du type :

$$\sum_{i,j=1}^N a_{ij} \frac{\partial^2 v(x)}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^N f_i(x) \frac{\partial v(x)}{\partial x_i} + g(x)v(x) = h(x) \quad (1.12)$$

on supposera $a_{ij}(x) = a_{ji}(x)$

si $A(x) = (a_{ij})_{1 \leq i,j \leq N}$ la matrice $N \times N$ symétrique des coefficients devant les termes d'ordre 2.

1.6.1 Classification des équations aux dérivées partielles de \mathbb{R}^N

1.6.1.1 Équation aux dérivées partielles elliptiques

Définition 1.13.

Une équation aux dérivées partielles linéaire de second ordre est dite elliptique si $A(x)$ n'admet que valeur propre non nulles et $x \in \Omega$ et qui sont toutes de même signe [10, 2, 6]

Exemple 6. (Équation de Laplace) soit $v(x,y,\dots)$ une fonction définie sur un $\Omega \in \mathbb{R}$, vérifiant l'équation de Laplace :

$$\Delta v = 0 \quad (1.13)$$

1.6.1.2 Équation aux dérivées partielles hyperbolique

Définition 1.14.

Une EDP est dite hyperboliques en $x \in \Omega$ si $A(x)$ n'admet que des valeurs propres non nulles et qui sont toutes même signe sauf une de signe opposé[10, 2, 13]

Exemple 7. (Équations des Ondes)

$$\frac{\partial v}{\partial t^2} - c^2 \Delta v = 0 \quad (1.14)$$

1.6.1.3 Équation aux dérivées partielles parabolique

Définition 1.15.

On dire que l'EDP est paraboliques en $x \in \Omega$ $A(x)$ admet $N-1$ valeurs propres non nulles de même signe et une valeur propre nulle

Exemple 8. (Équation de Schrödinger)

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u - V(x)u = f \quad 0 < x < L \quad (1.15)$$

Où :

- m la masse de la particule
- $V(x)$ l'énergie potentielle de la particule au point x
- ∇^2 est le laplacien
- $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \cdot 10^{-34} J_s$

1.6.2 Classification des équation aux dérivées partielles de \mathbb{R}^2

Définition 1.16. On appelle *EDP semi linéaire du second ordre*, d'un fonction inconnue v , on peut écrire sous la forme :

$$a(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2b(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y} + c(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x,y,u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}) \quad (1.16)$$

a, b, c trois fonctions définies dans un ouvert de \mathbb{R}^2 et f est une fonction définie dans un ouvert de \mathbb{R}

Remarque 1.1. la matrice A est définie sous cette forme :

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix}$$

alors le polynôme caractéristique de cette matrice :

$$\det(A - \lambda I) = \lambda^2 - (a - c\lambda + ac - b^2)$$

donc il y à deux valeurs propre λ_1 et λ_2 avec :

$$\lambda_1 \times \lambda_2 = \frac{ac - b^2}{1} \quad \text{et} \quad \lambda_1 + \lambda_2 = \frac{a + c}{2}$$

1.6.2.1 Équation aux dérivées partielles parabolique

Définition 1.17. Une équation et dit parabolique, dans un domaine telle que :

$$b^2(x,y) - a(x,y)c(x,y) = 0$$

Remarque 1. On dit que l'équation parabolique si une valeurs propre est nulle

$$\lambda_1 \times \lambda_2 = 0 \quad \implies \quad b^2 - ac = 0$$

Préliminaire

Exemple 9. (Équation de Schrödinger) $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ un ouvert quelconque

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u - V(x)u = f & 0 < x < L \\ u(0) = u(L) = 0 \end{cases} \quad (1.17)$$

1.6.2.2 Équation aux dérivées partielles elliptique

Définition 1.18. Une équation est dite elliptique, dans un domaine telle que :

$$b^2(x, y) - a(x, y)c(x, y) < 0$$

Remarque 1.2. On dit que l'équation elliptique si les valeurs propre sont nulles et de même signe alors :

$$\begin{aligned} \lambda_1 \times \lambda_2 > 0 &\implies ac - b^2 > 0 \\ &\implies b^2 - ac < 0 \end{aligned}$$

Exemple 10. (Équation de Laplace)

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = 0 \\ v(x, 0) = f(x) \\ v(x, \infty) = 0 \end{cases} \quad (1.18)$$

1.6.2.3 Équation aux dérivées partielles hyperbolique

Définition 1.19. Une équation hyperbolique est dite, dans un domaine telle que Ω :

$$b^2(x, y) - a(x, y)c(x, y) > 0$$

Préliminaire

Remarque 2. *On dit que l'équation hyperbolique si :*

$$\begin{aligned}\lambda_1 \times \lambda_2 < 0 &\implies ac - b^2 < 0 \\ &\implies b^2 - ac > 0\end{aligned}$$

Exemple 11. (*Équation des ondes*)

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0 \\ v(x, 0) = f(x) \quad \text{donnée} \\ \frac{\partial v}{\partial t} v(x, 0) = h(x) \quad \text{donnée} \end{cases} \quad (1.19)$$

1.7 Formule de Green

Pour un ouvert Ω régulier, les formules de Green s'étendent à $H^1(\Omega)$.

Définition 1.20.

Pour toutes $(u, v) \in H^1(\Omega)^2$

$$\int_{\partial\Omega} u(x) \frac{\partial v}{\partial x_i}(x) dx = - \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_i}(x) v(x) dx + \int_{\Omega} \nabla u \nabla v dx$$

$\partial\Omega$ la frontière de Ω

1.8 Théorème de Lax-Milgram :

Soit H un espace de Hilbert

Définition 1.21.

Soit $a : H \times H \rightarrow \mathbb{R}$. Est une forme bilinéaire [4]

- continue : il existe $M > 0$ telle que

$$|a(u, v)| \leq M \|u\|_H \|v\|_H, \quad \forall (u, v) \in H \times H$$

- coercive : il existe $\lambda > 0$ tq :

$$a(u, u) \geq \lambda \|u\|_H^2, \quad \forall u \in H$$

Préliminaire

Définition 1.22.

$L(\cdot)$ est une forme linéaire continue sur H , c.à.d que $v \rightarrow L(v)$ est linéaire de H dans \mathbb{R} et il existe $c > 0$ tel que :

$$|L(v)| \leq c\|v\| \quad , \quad \forall v \in H$$

Théorème 1. Soit $a(u, v)$ une forme bilinéaire continue coercive sur l'espace de Hilbert H , soit $L(v)$ une forme linéaire continue sur H , le problème variationnel

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{chercher la fonction } u \text{ appartenant à l'espace de Hilbert } H \text{ telle que :} \\ a(u, v) = L(v) \quad \forall v \in H \end{array} \right. \quad (1.20)$$

admet une solution unique dans H

Chapitre 2

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

2.1 L'historique de Schrödinger

Selon L'équation de Louis de Broglie,1924 l'hypothèse posée dont toutes les particules peuvent être vues comme des ondes, liées comme le photon à la particule dont des relations déterminés

$$E = h\nu$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

ainsi, on appelle une fonction d'onde l'association d'une onde de fréquence et du longueur d'onde donnée dont toute particule d'énergie et de quantité de mouvement donné. cependant on détermine la célérité de l'onde et Luis de Broglie montre que ces relations sont compatibles avec la théorie de la relativité restreinte .

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

Ils sont aussi considèrent aux deux relations quantiques $E = \hbar\omega$ qui résulte l'énergie d'un photon à la pulsation ω et $p = \hbar K$ (nombre d'onde K) (et même au vecteur d'onde K) Il ayant posé $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ la constante de planck, ou constant de Dirac

L'une des conséquences les plus frappantes de cette dualité onde-corpuscule est que chaque particule peut interférer avec elle même, dans une expérience de Young par exemple, n'est pas seulement vrai pour les particules(élémentaires), comme le proton et l'électron est aussi vrai pour des atomes et des molécules. Ces résultats obtenus à pour établissement d'une équation régissant l'évolution au cours de temps (temporelle) et celle de système physique de la fonction d'onde(spatiale) conçues par le physicien autrichien Erwin Schrödinger 1926, l'équation ne se démontre pas.

Schrödinger a abouti à cette relation la considération du cas particulier d'une onde harmonique(localement)plane, éventuellement complexes :

$$u(x,t) = u_0 \exp(i(Kx - \omega t))$$

puis il utilise les relations proposées par Luis de Broglie :

$$u(x,t) = u_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}(Kx - \omega t)\right)$$

Il remarqua alors qu'en dérivant l'onde par rapport au temps, il vient

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x,t) = \frac{i}{\hbar} E u_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}(Kx - \omega t)\right) = -\frac{i}{\hbar} E u(x,t)$$

De même, le gradient de cette fonction d'onde donne :

$$\nabla u(x,t) = \frac{i}{\hbar} p u(x,t)$$

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

donc pour toute onde u de cette forme, en tout point et à tout instant :

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u &= Eu \\ -i\hbar \nabla u &= pu\end{aligned}$$

Pour une particule donnée, d'après la mécanique classique, l'énergie mécanique est donné par :

$$\begin{aligned}E &= E_e + E_p \\ &= \frac{1}{2}mv^2 + V(r) \\ &= \frac{p^2}{2m} + V(r)\end{aligned}$$

la somme de l'énergie potentielle et de l'énergie cinétique est appelée hamiltonien, qui s'identifie ici à l'énergie mécanique totale. En multipliant par la fonction d'onde :

$$\frac{p^2}{2m}u + V(x)u = Eu$$

Et enfin il utilise les résultats précédents :

$$\frac{(-i\hbar \nabla)^2}{2m}u + Vu = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u$$

Ce que l'on peut écrire sous l'une ou l'autre des deux formulations suivantes : toute fonction d'onde u vérifie, à tout instant et en tout point :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u(x,t) + V(x)u(x,t) = i\hbar \frac{\partial u(x,t)}{\partial t}$$

c'est-à-dire :

$$Hu = Eu$$

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

où la quantité \mathbf{H} est appelée **opérateur hamiltonien** ou plus souvent **hamiltonien**

Dans certain problème, il est possible de considérer des phénomènes indépendants de temps. L'énergie n'est alors plus une dérivée de la fonction d'onde, mais une constante. On a alors :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V - E\right)u = 0$$

ou encore :

$$Hu = Eu$$

gardant à l'esprit que E est un nombre, et pas un opérateur comme dans la formulation générale de l'équation

Les méthode des éléments finis et volumes finis

2.2 Éléments finis

La méthode des éléments finis est utilisée pour résoudre numériquement des équations aux dérivées partielles. L'idée de la méthode des éléments finis est de remplacer l'espace de Hilbert V sur le quel est posée la formulation variationnelle pour un sous-espace V_h de dimension fini et le problème (approche) posé sur V_h se ramène à la simple résolution d'un système linéaire. Dont la matrice est appelée matrices de rigidité. D'autre part on peut choisir le mode de construction de V_h de manière à ce que le sous-espace V_h soit une bonne approximation de V et que la solution u_h dans V_h de la formulation variationnelle ou proche de la solution exacte u dans V et à l'étude de l'erreur d'approximation correspondante.

2.3 Volumes finis

La méthode des volumes finis intégrée, sur des volumes élémentaires de forme simple, les équations écrites sous forme de loi de conservation. Elle fournit ainsi de manière naturelle des formulations discrètes conservatives et est donc particulièrement adaptée aux équations de la mécanique des fluides : équation de conservation de la masse, équation de conservations de la quantité de mouvement, équations de conservation de l'énergie. Sa mise en oeuvre est simple si les volumes élémentaires sont des rectangles (ou des parallélépipèdes rectangle en dimension 3). Cependant la méthode des volumes finis permet d'utiliser des volumes élémentaires de forme quelconque, donc de traiter des géométries complexes. Il existe une grande variété de méthodes selon le choix de la géométrie des volumes élémentaires et des formules de calcul des flux. Par contre, on dispose de peu de résultats théoriques de convergence.

2.4 Principe générales de la méthode des éléments finis

Nous considérons à nouveau le cadre général de la formulation variationnelle. Étant donné un espace de Hilbert V , $a(u, v)$ est une forme bilinéaire continue et coercive, $l(v)$ est une forme linéaire continue. On considère la formulation variationnelle

$$\text{trouver } u \in V \text{ tel que } a(u, v) = l(v) \quad \forall v \in V \quad (2.1)$$

dont on sait qu'elle admet une unique solution d'après le théorème de Lax-Milgram. On va chercher une approximation de u par approximations internes de (2.1). Consiste à remplacer l'espace de Hilbert V par un s.e. de dimension finie

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

V_h c.à.d à chercher la solution de

$$\text{trouve } u_h \in V_h \text{ tel que } a(u_h, v_h) = l(v_h) \quad \forall v_h \in V_h \quad (2.2)$$

la résolution de l'approximation interne (2.2) est facile comme la montre de lemme suivant.

Lemme 1.

Soit V un espace de Hilbert réel et V_h un sous-espace de dimension finie. Soit $a(u, v)$ une forme bilinéaire continue et coercive sur V . Et $l(v)$ une forme linéaire continue sur V alors l'approximation (2.2) admet une unique solution.

Preuve 2.1.

L'existence et l'unicité de $v_h \in V_h$ solution de (2.2) par la méthode de Lax-Milgram appliqué à v_h . pour mettre le problème sous une forme plus simple, on introduit une base $(\phi_j)_{1 \leq j \leq N_h}$ de V_h si $u_h = \sum_{j=1}^{N_h} \mu_j \phi_j$ on pose $u_h = (u_1, \dots, u_{N_h})$ le vecteur dans \mathbb{R}^{N_h} des coordonnées de V_h . le problème (2.2) est équivalent à :

trouver $V_h \in \mathbb{R}^{N_h}$ tel que $a(\sum_{j=1}^{N_h} \mu_j \phi_j, v_h) = L(v_h) \quad \forall v_h \in V_h$ on encore par linéarité de a et L

$$\text{trouver } \mu_j \in \mathbb{R}^{N_h} \text{ tel que } \sum_{j=1}^{N_h} \mu_j a(\phi_j, \phi_i) = L(\phi_i) \quad \forall i = 1 \dots N_h$$

ce qui s'écrit sous la forme d'un système linéaire

$$Au = b \quad \text{avec} \quad A = (a(\phi_j, \phi_i))_{1 \leq j, i \leq N_h}, \quad b = (L(\phi_i)) \quad i = 1 \dots N_h, \quad \mu = \sum_{j=1}^{N_h} \mu_j$$

$$A = \begin{bmatrix} a(\phi_1, \phi_2) & a(\phi_1, \phi_1) & \cdots & a(\phi_1, \phi_{N_h}) \\ a(\phi_2, \phi_1) & a(\phi_2, \phi_2) & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a(\phi_{N_h}, \phi_1) & a(\phi_{N_h}, \phi_2) & \cdots & a(\phi_{N_h}, \phi_{N_h}) \end{bmatrix}$$

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

et

$$b = \begin{bmatrix} L(\phi_1) \\ L(\phi_2) \\ \vdots \\ L(\phi_{N_h}) \end{bmatrix}$$

et

$$u = [u_1, u_2, \dots, u_{N_h}],$$

2.5 Formulation variationnelle

Soit le problème suivant :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u - V(x)u = f & 0 < x < L \\ u(0) = u(L) = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

Où :

- m la masse de la particule
- $V(x)$ l'énergie potentielle de la particule au point x
- ∇^2 est le laplacien
- $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \cdot 10^{-34} J_s$

Lorsque l'on cherche une solution de u qui ne dépende pas du temps (solution stationnaire), l'équation de Schrodinger indépendante du temps s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u(x) + V(x)u(x) - Eu(x) = f \quad (2.4)$$

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

où : E est l'énergie de la particule.

en prendre $V(x)=0$ donc l'équation de Schrödinger stationnaire en dimension un devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) - Eu(x) = f \quad (2.5)$$

$f \in L^2(]0, L[)$. Une solution de classique (ou solutions forte) de (2.3) est une fonction de $C^2([0, L])$ telle que $u(0)=u(L)=0$ et $\forall x \in]0, L[$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) - Eu(x) = f$$

En faisant le produit scalaire de $L^2(]0, L[)$ l'équation différentielle avec une fonction test $w \in H_0^1(]0, L[)$ donc

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L u''(x)w(x)dx - \int_0^L Eu(x)w(x)dx = \int_0^L f(x)w(x)dx$$

En intégrant par partie le premier terme :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L u'(x)w'(x)dx - \int_0^L Eu(x)w(x)dx = \int_0^L f(x)w(x)dx$$

$w(0)=w(L)=0$ puisque $w \in H_0^1(]0, L[)$ Alors, on peut définir le nouveau problème :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } w \in H_0^1(]0, L[) \\ \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L u'(x)w'(x)dx - E \int_0^L u(x)w(x)dx = \int_0^L f(x)w(x)dx \quad w \in H_0^1(]0, L[) \end{array} \right. \quad (2.6)$$

Ce problème est la **formulation variationnelle (ou formulations faible)** du problème(2.3) Pour toute $f \in L^2(\Omega)$ il existe $u \in H_0^1(\Omega)$ unique solution faible de (2.6)

2.6 Éléments de Lagrange

2.6.1 Unisolvance

Définition 2.1.

Soit $\Sigma = \{a_1, a_2, \dots, a_N\}$ un ensemble de N points distinct de \mathbb{R}^n . soit P un espace vectoriel de dimension finie de fonctions de \mathbb{R}^n à valeur P dans \mathbb{R} . on dit que Σ **P-unisolvance** si pour tout réels $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$, il existe un unique élément p de P tel que $P(a_i) = \alpha_i, i = 1 \dots N$ cela revient à dire que la fonction de p dans \mathbb{R}^n qui à p fait correspondre [3]

$$(p(a_1), p(a_2), \dots, p(a_N)) = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$$

est bijective.

En pratique, on montre que Σ est P -unisolvant en vérifiant que $\dim P = \text{card} \Sigma$, puis en montrant l'injectivité au surjectivité de L

- L'injectivité de L se démontre en établissant que la seule fonction de P s'annulant sur tous les points de Σ est la fonction nulle.
- La surjectivité de L se démontre une famille $\{p_1, p_2, \dots, p_N\}$, d'éléments de P tels que $p_i(a_j) = \delta_{ij}$ c.à.d un antécédent pour L de la base canonique de \mathbb{R}^N
En effet, étant donnés des réels $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ la fonction $p = \sum_{i=1}^N \alpha_i p_i$ vérifie alors $p(a_j) = \alpha_j, j = 1, \dots, N$

2.6.2 Éléments finis de Lagrange

Définition 2.2.

un élément fini de Lagrange est un triplet (K, Σ, P) tel que [3] :

- K est un élément géométrique de \mathbb{R}^n , ($n=1, 2$ ou 3), compact, connexe et d'intérieur non vide.

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

- $\Sigma = \{a_1, \dots, a_N\}$ est un ensemble finie de N points distincts de K .
- P est un espace vectoriel de dimension finie de fonctions réelles sur K et tel que Σ soit P -unisolvant donc $\dim P = N$

Définition 2.3.

soit triplet (K, Σ, P) un élément fini de Lagrange. on appelle les fonctions de base locales de l'élément les N fonction $P_i, i = 1, \dots, N$ de P tel que

$$p_i(a_j) = \delta_{ij}, 1 \leq i, j \leq N$$

on vérifie aisément que (p_1, \dots, p_N) ainsi définie est une base de P [3]

Définition 2.4.

On appelle opérateur de **P-interpolation** sur Σ l'opérateur π_K , qui à toutes fonction v définie $\pi_K v$ sur K , associe la fonction $\pi_K v$ de P définie par [3]

$$\pi_K v = \sum_{i=1}^N v(a_i) p_i$$

Remarque 3. $\pi_K v$ est donc l'unique élément de P qui prend les même valeur que v sur les points de Σ

Exemples d'élément finis de Lagrange

Espace de polynômes

On notera P_k l'espace vectoriel des polynômes de degré total inférieur ou égale à k [3]

- Sur \mathbb{R} , $P_k = \text{Vect}\{1, X, \dots, X^k\}$ et $\dim P_k = k + 1$.
- Sur \mathbb{R}^2 , $P_k = \text{Vect}\{X^i X^j; 0 \leq i + j \leq k\}$ et $\dim P_k = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$
- Sur \mathbb{R}^3 , $P_k = \text{Vect}\{X^i Y^j Z^l; 0 \leq i + j + l \leq k\}$ et $\dim P_k = \frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{6}$

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

On notera Q_k l'espace vectoriel de polynômes de degré inférieur ou égal à k par rapport à chaque variable

- Sur \mathbb{R} , $Q_k = P_k$
- Sur \mathbb{R}^2 , $Q_k = \text{Vect}\{X^i X^j; 0 \leq i, j \leq k \text{ et } \dim Q_k = (k+1)(k+2)^2$
- Sur \mathbb{R}^3 , $P_k = \text{Vect}\{X^i Y^j Z^l; 0 \leq i, j, l \leq k\}$ et $\dim P_k = (k+1)^6$

Exemples un dimensionnels 1-D

On discrétise le segment $[a; b]$ avec des polynômes de degrés 1 à m . On obtient les éléments de tableau (2.1) [3]

Élément	P_1	P_2	...	P_m
K	$[a, b]$	$[a, \frac{a+b}{2}]$...	$[a + i \frac{a-b}{m}, i = 1, \dots, m]$
Σ	$\{a, b\}$	$\{a, b\}$...	$\{a, b\}$
P	P_1	P_2	...	P_m

TABLE 2.1 – Éléments de Lagrange unidimensionnels de degrés 1 à m

Exemple 2-D triangulaires

On discrétise le triangle de sommets $\{a_1, a_2, a_3\}$ avec, le long de chaque arête, une introspection polynomiale de degré 1 à un on obtient les éléments du tableau (2.2) [3]

Élément	P_1	P_2
K	tringle de sommets a_1, a_2, a_3	tringle de sommets $\{a_1, a_2, a_3\}$
Σ	$\{a_1, a_2, a_3\}$	$\{a_{ij} = \frac{a_i + a_j}{2}, 1 \leq i, j \leq 3\}$
P	P_1	P_2

TABLE 2.2 – Éléments de Lagrange bidimensionnels triangulaires de degrés 1 à 2

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

Remarque 4. Les fonctions de base pour l'élément P_1 sont définies par $p_i(a_j) = \sigma_{ij}$ ce sont les coordonnées barycentriques : $p_i = \lambda_i$

et les fonctions de base pour l'élément p_2 sont $p_i = \lambda_i(2\lambda_i - 1)$ et $p_{ij} = 4\lambda_i\lambda_j$

Exemple 2-D rectangulaires

On discrétise le rectangle de sommets $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$ de cotés parallèles aux axes la formulation est décrite dans le tableau (2.2) [3] la fonction de base sont

Élément	Q_1
K	rectangle de sommets $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$ de cotés parallèles aux axes
Σ	$\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$
P	Q_1

TABLE 2.3 – Élément de Lagrange bidimensionnel rectangulaire de degré 1

$P_i(X, Y) = \frac{(X-x_j)(Y-y_j)}{(x_i-x_j)(y_i-y_j)}$, au (x_i, y_i) sont les coordonnées (x_j, y_j) est le coin opposé à a_i $i \neq j$.

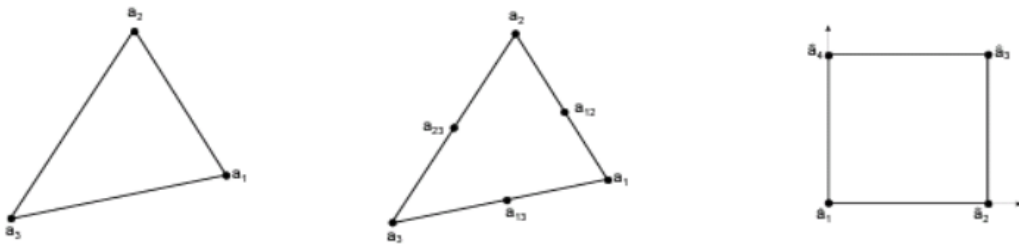


FIGURE 2.1 – Élément finis de Lagrange 2D : triangulaire P_1 , triangulaires P_2 et rectangulaire Q_1

Exemple tridimensionnels

1. Éléments [3] tétrédrique p_1 :

les fonctions de base sont $P_i = \lambda_i(2\lambda_i - 1)$ et $P_{ij} = 4\lambda_i\lambda_j$

2. Élément parallélépipédique Q_1 :

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

Élément	P_1	P_2
K	tétraédrique de sommets $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$	tétraédrique de sommets $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$
Σ	$\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$	$\{a_i\}_{1 \leq i \leq 4} \cup \{a_{ij}\}_{1 \leq i < j \leq 4}$
P	P_1	P_2

TABLE 2.4 – Éléments de Lagrange tridimensionnels tétraédriques de degrés 1 et 2

Éléments	Q_1
K	parallélépipède de sommets $\{a_1, \dots, a_8\}$ de côtés parallèles aux axes.
Σ	$\{a_i\}_{1 \leq i \leq 8}$
P	Q_1

TABLE 2.5 – Élément de Lagrange tridimensionnel parallélépipédique de degré 1

3. Éléments prismatique Q_1 :

Élément	Q_1
K	prismedroitdesommets $\{a_1, \dots, a_6\}$
Σ	$\{a_i\}_{1 \leq i \leq 6}$
P	$\{p(X, Y, Z) = (a + bX + cY) + Z(d + eX + fY), a, b, c, d, e, f \in \mathbb{R}\}$

TABLE 2.6 – Élément de Lagrange tridimensionnel prismatique

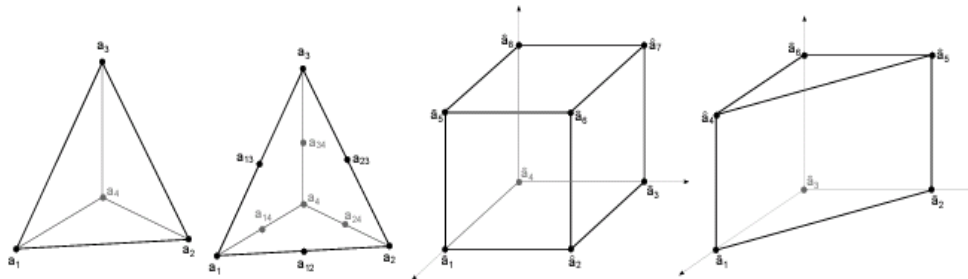


FIGURE 2.2 – Éléments finis de Lagrange tridimensionnels : tétraédrique P_1 et P_2 , parallélépipédique Q_1 et prismatique

2.7 Famille affine d'éléments finis

Définition 2.5.

Deux éléments finis $(\hat{K}, \hat{\Sigma}, \hat{P})$ et (K, Σ, P) sont **affine-équivalents** ssi il existe une fonction affine F inversible [3] : $(F : \hat{x} \rightarrow B\hat{x}+b)$ telle que :

- i- $K = F(\hat{K})$
- ii- $a_i = F(\hat{a}_i) \quad i = 1, \dots, N$
- iii- $P = \{p \circ F^{-1}\}, p \in \hat{P}$

Remarque 5. :

Si l'on est dans \mathbb{R} , B est donc une matrice $n \times n$ inversible, et b est un vecteur de \mathbb{R}^n

Définition 2.6.

soient $(\hat{K}, \hat{\Sigma}, \hat{P})$ et (K, Σ, P) deux éléments finis affine-équivalents, via une transformation F [3]

On note $\hat{p}_i (i = 1, \dots, N)$ les fonctions de base locales de \hat{K} Alors les fonctions de base locale des K sont les $p_i = \hat{p}_i \circ F^{-1}$

Définition 2.7.

On appelle **famille affine d'éléments finis** une famille d'éléments finis tous affine-équivalents à un même élément fini $(\hat{K}, \hat{\Sigma}, \hat{P})$ appelé **élément de référence**.

D'un point de vue pratique, le fait de travailler avec une famille affine d'éléments finis permet de ramener tous les calculs d'intégrales à des calculs sur l'élément de référence :

les éléments de référence sont [3] :

- 1 En 1-D : le segment $[0, 1]$.
- 2 En 2-D triangulaire : le triangle unité, de sommets $(0, 0), (0, 1)$ et $(1, 0)$.
- 3 En 2-D rectangulaire : le carré unité $[0, 1] \times [0, 1]$.

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

- 4 En 3-D tétraédriques : le tétraèdre unité, le sommets $(0,0,0), (0,1,0), (1,0,0)$ et $(0,0,1)$.
- 5 En 3-D parallélépipédique : le cube unité $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$.
- 6 En 3-D prismatique : le prisme unité de sommets $(0,0,0), (0,1,0), (1,0,0)$ et $(0,0,1), (0,1,1), (1,0,1)$.

2.8 Élément fini d'Hermite

Définition 2.8.

Un **élément fini d'Hermite** ou **éléments fini général** est un triplet (K, Σ, P) [3] tel que :

1. K est un élément fini géométrique de \mathbb{R}^n ($n=1,2$ ou 3) compact connexe, et d'intérieur non vide .
2. $\Sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ est un ensemble de N formes linéaires sur l'espace des fonctions définies sur K , ou sur un sous-espace plus régulier contenant P .
3. P est un espace vectoriel de dimension N de fonctions réelles définies sur K , et tel que Σ soit P -unisolvant.

Définition 2.9.

Soient triple (K, Σ, P) un élément fini de général. on appelle fonctions de base locales de l'élément les N fonction [3] $P_i (i = 1, \dots, N)$ de P tel que

$$\sigma_j(p_i) = \delta_{ij}, 1 \leq i, j \leq N$$

Définition 2.10.

On appelle **opérateur de P-interpolation** sur Σ l'opérateur π_K , qui à toutes fonction v définie sur K , associe la fonction $\pi_K v$ de P définie par

$\pi_K v = \sum_{i=1}^N \sigma_i(v) p_i$. $\pi_K v$ est donc l'unique élément de P qui prend les même valeur que v sur les points de Σ [3].

2.9 Lien avec les éléments finis de Lagrange

Avec les définitions précédentes, les éléments finis de Lagrange apparaissent donc comme un cas particulier des éléments finis généraux, pour lequel

$$\sigma_i(p) = p(a_i), \quad 1 \leq i \leq N$$

Cette généralisation permet maintenant d'introduire des opérateurs de dérivation dans Σ , et donc d'améliorer la régularité des fonctions de V_h [3]

2.10 Exemples

Exemple 1-D

Les éléments finis unidimensionnels cubiques et quintiques [3] :

Élément	cubique	quintique
K	segment $[a, b]$	segment $[a, b]$
Σ	$\{p(a), p'(a), p(b), p'(b)\}$	$\{p(a), p'(a), p''(a), p(b), p''(b), p'''(b)\}$
P	P_3	P_5
Régularité	C^1 et H^2	C^2 et H^3

TABLE 2.7 – Élément d'Hermite unidimensionnels de degrés 3 et 5

Exemples 2-D triangulaires

les éléments finis bidimensionnels triangulaires : on distingue l'élément cubique d'Hermite, qui est C^0 , et l'élément d'Argyris, qui est C^1 [3].

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

Élément	cubique	Argyris
K	triangle de sommets $\{a_1, a_2, a_3\}$	triangle de sommets $\{a_1, a_2, a_3\}$
Σ	$\{p(a), \frac{\partial p}{\partial x}(a_i), i = 1, 2, 3\} \cup \{p(a_0)\}$	$\{p(a_i), \frac{\partial p}{\partial x}(a_i), \frac{\partial p}{\partial y}(a_i), \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(a_i), \frac{\partial^2 p}{\partial y^2}(a_i), \frac{\partial^2 p}{\partial x \partial y}(a_i), i = 1, 2, 3\} \cup \{\frac{\partial p}{\partial n}(a_i)\}, 1 \leq i \leq j \leq 3$
P	P_3	p_5
Régularité	C^0 mais pas C^1	C^1

TABLE 2.8 – Élément bidimensionnel triangulaire d’Hermite et d’Argyris

Exemple 2-D rectangulaire

Les éléments finis bidimensionnels rectangulaire [3]

Élément	Q_3
K	rectangle de sommets $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$ de côtés parallèles ax axes
Σ	$\{p(a_i), \frac{\partial p}{\partial x}(a_i), \frac{\partial p}{\partial y}(a_i), \frac{\partial^2 p}{\partial x \partial y}(a_i), i = 1, 2, 3, 4\}$
P	P_3
Régularité	C^1

TABLE 2.9 – Tableau : Élément bidimensionnel rectangulaire d’Hermite Q_3

2.11 Estimation d’erreur

Théorème 2 (Lemme de Céa). [8]

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{M}{\alpha} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|_V,$$

Équation de Schrödinger et la méthode des éléments finis et volume finis

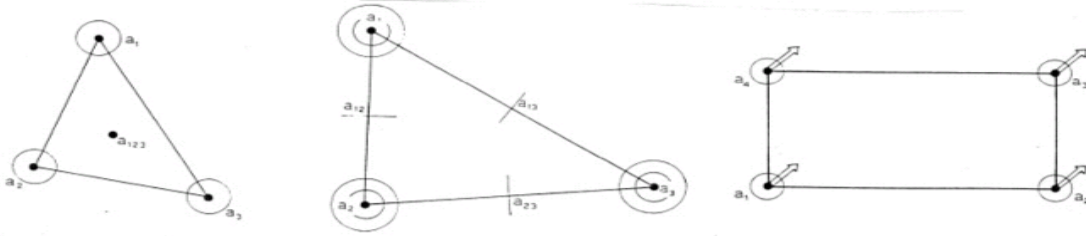


FIGURE 2.3 – Élément triangulaire d’Hermite cubique, éléments d’Argyris et l’élément rectangulaire Q_3

M et α de Lax-Milgram.

Preuve 2.2. Fixons $v_h \in V_h$. D’après le lemme ($u_h - v_h \in V_h$)

$$a(u - u_h, u - u_h) = a(u - u_h, u - v_h)$$

coercives de a $\|u - u_h\|_V^2 \leq a(u - u_h, u - u_h)$

continuité da a $a(u - u_h, u - v_h) \leq M \|u - u_h\|_V \|u - v_h\|_V$

$$\|u - u_h\|_V^2 \leq \frac{1}{\alpha} a(u - u_h, u - u_h) \leq \frac{M}{\alpha} \|u - u_h\|_V \|u - v_h\|_V \quad v_h \in V_h$$

Chapitre 3

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

3.1 Résoudre le problème de Schrödinger par la méthode d'élément fini :

On considère le problème de Schrödinger stationnaire en dimension 1 :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) - Eu(x) = f \\ u(0) = u(L) = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

où f une fonction donnée continue sur $]0, L[$, En faisant le produit scalaire $L^2(]0, L[)$ l'équation différentielle avec une fonction test $w \in H_0^1(]0, L[)$ donc :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L u''(x)w(x)dx - E \int_0^L u(x)w(x)dx = \int_0^L f(x)w(x)dx$$

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

par l'intégration par partie on a :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L u'(x)w'(x)dx - E \int_0^L u(x)w(x)dx = \int_0^L f(x)w(x)dx$$

$$\forall w \in H_0^1(]0, L[)$$

On peut donc définir le nouveau problème :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } w \in H_0^1(]0, L[) \\ \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L u'(x)w'(x)dx - E \int_0^L u(x)w(x)dx = \int_0^L f(x)w(x)dx \quad w \in H_0^1(]0, L[) \end{array} \right. \quad (3.2)$$

Ce problème est la formulation variationnelle du problèmes (3.1).

soit :

$$a(u, w) = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L u'(x)w'(x)dx - E \int_0^L u(x)w(x)dx$$

et

$$l(w) = \int_0^L f(x)w(x)dx$$

On va montrer que la forme $l(w)$ est continue :

$$\begin{aligned} |l(w)| &= \left| \int_0^L f(x)w(x)dx \right| \\ &\leq \int_0^L |f(x)w(x)|dx \quad \text{avec } f \in L^2(]0, L[) \\ &\leq \left[\int_0^L |f(x)|^2 dx \right]^{1/2} \cdot \left[\int_0^L |w(x)|^2 dx \right]^{1/2} \\ &\leq \|f\|_{L^2} \cdot \|w\|_{L^2} \\ &\leq c \|w\| \end{aligned}$$

Donc la forme linéaire $L(w)$ est continue.

Maintenant, montrons que la forme bilinéaire $a(u, w)$ est continue :

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

$$\begin{aligned}
 |a(u, w)| &= \left| \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L u'(x)w'(x)dx - E \int_0^L u(x)w(x)dx \right| \\
 &\leq \frac{\hbar^2}{2m} \left[\int_0^L |u'^2(x)|dx \right]^{1/2} \cdot \left[\int_0^L |w'^2(x)|dx \right]^{1/2} + E \left[\int_0^L |u^2(x)|dx \right]^{1/2} \cdot \left[\int_0^L |w^2(x)|dx \right]^{1/2} \\
 &\leq \frac{\hbar^2}{2m} \|u'\|_{L^2} \cdot \|w'\|_{L^2} + E \|u\|_{L^2} \cdot \|w\|_{L^2} \\
 &\leq \frac{\hbar^2}{2m} \|u\|_{H_0^1} \cdot \|w\|_{H_0^1} + E \|u\|_{H_0^1} \cdot \|w\|_{H_0^1} \\
 &\leq \left(\frac{\hbar^2}{2m} + E \right) \|u\|_{H_0^1} \cdot \|w\|_{H_0^1} \\
 &\leq M \|u\|_{H_0^1} \cdot \|w\|_{H_0^1}, \quad M = \frac{\hbar^2}{2m} + E
 \end{aligned}$$

Donc $a(u, w)$ est continue

Après on va montre que $a(u, u)$ est coercive :

$$\begin{aligned}
 a(u, u) &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L u'(x)u'(x)dx - E \int_0^L u(x)u(x)dx \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\int_0^L u'^2 dx \right] - E \left[\int_0^L u^2 dx \right] \\
 &\geq \frac{\hbar^2}{2m} \|u'\|_{L^2}^2 + E \|u\|_{L^2}^2 \\
 &\geq \frac{\hbar^2}{2m} \|u\|_{H_0^1}^2 + E \|u\|_{H_0^1}^2 \\
 &\geq \left(\frac{\hbar^2}{2m} + E \right) \|u\|_{H_0^1}^2 \\
 &\geq M \|u\|_{H_0^1}^2, \quad M = \frac{\hbar^2}{2m} + E
 \end{aligned}$$

$a(u, w)$ est une forme bilinéaire symétrique continue coercive sur $H_0^1(0, L) \times H_0^1(0, L)$ et l est une forme linéaire continue sur $H_0^1(0, L)$.

Donc le problème (3.2) admet une solution unique d'après le théorème de Lax-Milgrame .

On approche l'espace $H_0^1(0, L)$ par l'espace $W_{0,h} \subset H_0^1(0, L)$ construit de la manière suivante.

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

On choisit une discrétisation de l'intervalle $]a, b[$ en N sous-intervalles ou éléments $K_i = [x_{i-1}, x_{i+1}]$

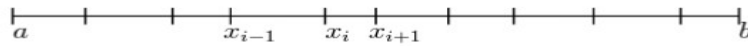


FIGURE 3.1 – Discrétisation (maillage) du segment $[0; L]$ en éléments finis P1

Les éléments K_i n'ont pas forcément même longueur, l'espace W_h sous-espace de $H_0^1(0, L)$ de dimension finie par :

$$W_h = \{w_h \in C^0(a, b) / w_h \text{ affine sur chaque segment } [x_{i-1}, x_{i+1}] \text{ et } w(a) = w(b) = 0\}$$

Le problème approché sur W_h est :

$$(3.2) \text{ trouver } u_h \in W_h \text{ tel que } a(u_h, w_h) = L(w_h) \quad \forall w_h \in W_h.$$

Considérons les N fonction $\varphi_i \in W_{0,h}$ définies par le N condition suivantes :

$$\varphi_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad \forall i = 1, \dots, N \text{ et } \forall j = 1, \dots, N$$

w_h est une fonction quelconque s'écrit dans cette base :

$$w_h(x) = \sum_{i=1}^N w_i \varphi_i(x)$$

avec $w_i = w_h(x_i)$, les coefficient w_i sont donc les valeurs de w_h aux point (x_i)

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

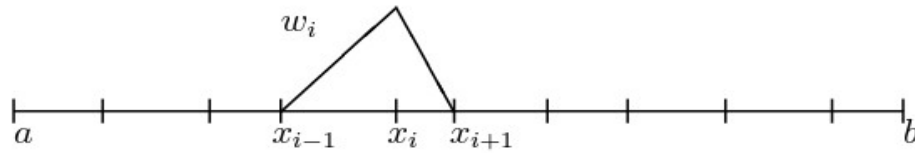


FIGURE 3.2 – Fonction de base de Lagrange de P_1

3.1.1 Écriture du problème approché

le problème approché dans $W_{0,h}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{trouver la fonction } u_h \text{ appartenant } W_{0,h} \text{ telle que } w_h \in W_{0,h} \\ \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L u_h'(x) w_h'(x) dx - E \int_0^L u_h(x) w_h(x) dx = \int_0^L f(x) w_h(x) dx \end{array} \right.$$

Le problème étant linéaire, l'égalité est vraie pour tout w_h si elle est vraie pour une base de l'espace vectoriel $W_{0,h}$

$\forall w_h \in W_h \Leftrightarrow \forall \varphi_i$ pour $i = 1 \dots N$ Donc, écrivons u_h solution de problème approché dans $W_{0,h}$ dans le base φ_i

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^N u_j \varphi_j(x)$$

avec $u_h(x_j)$ valeur approché de la solution exacte au point (x_j)

On obtient l'écriture suivant de problème approché :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } u_1, u_2, \dots, u_N \text{ telle que } i=1 \dots N \\ \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \left(\int_0^L \varphi_j'(x) \varphi_i'(x) \right) u_j(x) dx - \sum_{j=1}^N \left(\int_0^L E \varphi_j(x) \varphi_i(x) \right) u_j(x) dx = \int_0^L f(x) \varphi_i(x) dx \end{array} \right. \quad (3.3)$$

Soient

$$F_i = \int_0^L f(x) \varphi_i(x) dx$$

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

et

$$A_{ij} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L \varphi_j'(x) \varphi_i'(x) dx - E \int_0^L \varphi_j(x) \varphi_i(x) dx$$

$$\sum_{j=1}^N A_{ij} u_j = F_i \quad \forall i = 1, N$$

Alors la forme matricielle suivant :

$$AU = F$$

3.1.2 Calcul des coefficients A_{ij} de la matrice A

Le calcul des coefficients de la matrice A et du second membre, par assemblage des contributions des éléments $T_i = [x_{i-1}, x_{i+1}]$ pour $i = 1, N$.

La matrice A apparait comme la somme de deux matrices K et M

K constituée des coefficients

$$K_{ij} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L \varphi_j'(x) \varphi_i'(x) dx$$

S'appelle la matrice de raideur.

M constitue, dans le cas $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ des coefficients

$$M_{ij} = -E \int_0^L \varphi_j(x) \varphi_i(x) dx$$

S'appelle la matrice de masse.

où $M_h, K_h \in \mathbb{R}^N$ sont donnée par :

$$(M_h)_{ij} = m(\varphi_i, \varphi_j) \begin{cases} m(\varphi_i, \varphi_{i+1}) = -E \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i(x) \varphi_{i+1}(x) dx \\ m(\varphi_i, \varphi_{i-1}) = -E \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i(x) \varphi_{i-1}(x) dx \\ m(\varphi_i, \varphi_i) = -E \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i^2(x) dx - E \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i^2(x) dx \\ 0 \text{ si } |i - j| \geq 2 \end{cases}$$

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

et

$$(K_h)_{ij} = a(\varphi_i, \varphi_j) = \begin{cases} a(\varphi_i, \varphi_{i+1}) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i'(x) \varphi_{i+1}'(x) dx \\ a(\varphi_i, \varphi_{i-1}) = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i'(x) \varphi_{i-1}'(x) dx \\ a(\varphi_i, \varphi_i) = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i'^2(x) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i'^2(x) dx \\ 0 \text{ si } |i-j| \geq 2 \end{cases}$$

On à :

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{h} \text{ si } x \in [x_{i-1}, x_i] \\ -\frac{x-x_{i+1}}{h} \text{ si } x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0 \end{cases}$$

et

$$\varphi_{i-1}(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-2}}{h} \text{ si } x \in [x_{i-2}, x_{i-1}] \\ -\frac{x-x_i}{h} \text{ si } x \in [x_{i-1}, x_i] \\ 0 \end{cases}$$

et

$$\varphi_{i+1}(x) = \begin{cases} \frac{x-x_i}{h} \text{ si } x \in [x_i, x_{i+1}] \\ -\frac{x-x_{i+2}}{h} \text{ si } x \in [x_{i+1}, x_{i+2}] \\ 0 \end{cases}$$

On veut calculer les coefficients de la matrice K_h :

$$\begin{aligned} a(\varphi_i, \varphi_{i-1}) &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i'(x) \varphi_{i-1}'(x) dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left(\frac{-1}{h}\right) \left(\frac{1}{h}\right) dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2mh} \end{aligned}$$

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

$$\begin{aligned}
 a(\varphi_i, \varphi_i) &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i'^2(x) dx + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i'^2(x) dx \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left(\frac{1}{h^2}\right) + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(\frac{1}{h^2}\right) dx \\
 &= \frac{\hbar^2}{mh}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 a(\varphi_i, \varphi_{i+1}) &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i'(x) \varphi_{i+1}'(x) dx \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(\frac{-1}{h}\right) \left(\frac{1}{h}\right) dx \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2mh}
 \end{aligned}$$

Maintenant on veut calculer les coefficients de la matrice M_h :

$$\begin{aligned}
 m(\varphi_i, \varphi_{i-1}) &= -E \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i(x) \varphi_{i-1}(x) dx \\
 &= -E \left(\frac{-1}{h^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_i)(x - x_{i-1}) dx\right) \\
 &= E \frac{1}{h^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x^2 - x(x_i + x_{i-1}) + x_i x_{i-1}) dx \\
 &= E \frac{1}{h^2} \left[\frac{1}{3} x^3 - \frac{1}{2} x^2 (x_i + x_{i-1}) + x x_i x_{i-1} \right]_{x_{i-1}}^{x_i} \\
 &= E \frac{1}{h^2} \left[\frac{1}{3} (x_i^3 - x_{i-1}^3) - \frac{1}{2} (x_i^2 - x_{i-1}^2) (x_i + x_{i-1}) + (x_i - x_{i-1}) x_i x_{i-1} \right] \\
 &= E \frac{1}{6} h
 \end{aligned}$$

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

$$\begin{aligned}
 m(\varphi_i, \varphi_{i+1}) &= -E \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i(x) \varphi_{i+1}(x) dx \\
 &= -E \left(\frac{-1}{h^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i)(x - x_{i+1}) dx \right) \\
 &= E \frac{1}{h^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x^2 - x(x_i + x_{i+1}) + x_i x_{i+1}) dx \\
 &= E \frac{1}{h^2} \left[\frac{1}{3} x^3 - \frac{1}{2} x^2 (x_i + x_{i+1}) + x x_i x_{i+1} \right]_{x_i}^{x_{i+1}} \\
 &= E \frac{1}{h^2} \left[\frac{1}{3} (x_i^3 - x_{i+1}^3) - \frac{1}{2} (x_i^2 - x_{i+1}^2) (x_i + x_{i+1}) + (x_i - x_{i+1}) x_i x_{i+1} \right] \\
 &= E \frac{1}{6} h
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 m(\varphi_i, \varphi_i) &= -E \left(\int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i^2(x) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i^2(x) dx \right) \\
 &= -E \left(\frac{-1}{h^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1})^2 dx + \frac{-1}{h^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_{i+1})^2 dx \right) \\
 &= -E \left(\frac{-1}{h^2} \left[\frac{1}{3} (x - x_{i-1})^3 \right]_{x_{i-1}}^{x_i} + \frac{-1}{h^2} \left[\frac{1}{3} (x - x_{i+1})^3 \right]_{x_i}^{x_{i+1}} \right) \\
 &= -E \left(\frac{-1}{3h^2} ((x_i - x_{i-1})^3) + \frac{-1}{3h^2} (x_i - x_{i+1})^3 \right) \\
 &= -E \frac{2}{3} h
 \end{aligned}$$

$$K = \frac{\hbar^2}{2mh} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & \cdots & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

et

$$M = \frac{Eh}{6} \begin{pmatrix} -4 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -4 & 1 & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 1 & -4 \end{pmatrix}$$

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

3.1.3 Calcul des composantes du second membre F

Chaque composante F_i du vecteur second-membre globale

$$F_i = \int_0^L f(x) \varphi_i(x) dx$$

On à

$$f(x) = \left(\frac{2\hbar^2}{mL} - E\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$$

$$\text{On pose } Z = \left(\frac{2\hbar^2}{mL} - E\right)$$

$$\begin{aligned} F_i &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left(\frac{2\hbar^2}{mL} - E\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \varphi_i(x) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(\frac{2\hbar^2}{mL} - E\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \varphi_i(x) dx \\ &= Z \left[\int_{x_{i-1}}^{x_i} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \left(\frac{x - x_{i-1}}{h}\right) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \left(-\frac{x - x_{i+1}}{h}\right) dx \right] \\ &= \frac{Z}{h} \left[\int_{x_{i-1}}^{x_i} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) (x - x_{i-1}) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) (-x + x_{i+1}) dx \right] \end{aligned}$$

$$\text{On pose } A = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) (x - x_{i-1}) dx$$

$$\text{et } B = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) (-x + x_{i+1}) dx$$

Donc On utilisé l'intégrale par partie :

$$\begin{aligned} A &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) (x - x_{i-1}) dx \\ &= \left[-\frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) (x - x_{i-1})\right]_{x_{i-1}}^{x_i} + \frac{L}{2\pi} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) dx \\ &= \left[-\frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) (x - x_{i-1})\right]_{x_{i-1}}^{x_i} + \frac{L^2}{4\pi^2} \left[\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right]_{x_{i-1}}^{x_i} \\ &= -\frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) (x_i - x_{i-1}) + \frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x_{i-1}\right) (x_{i-1} - x_{i-1}) + \frac{L^2}{(2\pi)^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) - \frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i-1}\right) \\ &= -\frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) (x_i - x_{i-1}) + \frac{L^2}{(2\pi)^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) - \frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i-1}\right) \end{aligned}$$

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

$$\text{donc : } A = \left[-\frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right)h + \frac{L^2}{(2\pi)^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) - \frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i-1}\right) \right]$$

Calcul le B :

$$\begin{aligned} B &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)(-x + x_{i+1})dx \\ &= \left[-\frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)(-x + x_{i+1}) \right]_{x_i}^{x_{i+1}} - \frac{L}{2\pi} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)dx \\ &= \left[-\frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)(-x + x_{i+1}) \right]_{x_i}^{x_{i+1}} - \left[\frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \right]_{x_i}^{x_{i+1}} \\ &= -\frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x_{i+1}\right)(-x_{i+1} + x_{i+1}) + \frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right)(-x_i + x_{i+1}) - \frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i+1}\right) + \frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) \\ &= \frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right)h - \frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i+1}\right) + \frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) \end{aligned}$$

donc :

$$\begin{aligned} F_i &= A + B \\ &= \frac{Z}{h} \left[-\frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right)h + \frac{L^2}{(2\pi)^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) - \frac{L^2}{(2\pi)^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i-1}\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right)h - \frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i+1}\right) + \frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) \right] \\ &= \frac{Z}{h} \left[\frac{L^2}{2\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) - \frac{L^2}{(2\pi)^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i-1}\right) - \frac{L^2}{4\pi^2} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i+1}\right) \right] \\ &= \frac{Z}{h} \frac{L^2}{4\pi^2} \left[2\sin\left(\frac{2\pi}{L}x_i\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i-1}\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{L}x_{i+1}\right) \right] \end{aligned}$$

3.2 Le problème de Schrödinger par la méthode de volume fini :

On présente la méthode de volume fini pour l'équation de Schrödinger en dimension 1 :

On considère les équations suivantes :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) - Eu(x) = f \\ u(0) = u(L) = 0 \end{cases} \quad (3.4)$$

3.2.1 Maillage

On discrétise l'intervalle $[0,1]$ en introduisant un maillage T de l'intervalle $[0, 1]$ définie de la forme suivante [12] :

- Soient N volumes de contrôle appelés aussi cellules, notés K_i , pour $i = 1, \dots, N$:

$$K_i =]x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}[$$

avec les points $x_{i+\frac{1}{2}} \in [0, 1]$ tels que $0 = x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \dots < x_{N-\frac{1}{2}} < x_{N+\frac{1}{2}} = 1$.

- A chaque cellule K_i , on associe un point (centre) $x_i \in K_i$ tel que :

$$0 = x_0 = x_{\frac{1}{2}} < x_1 < \dots < x_{i-\frac{1}{2}} < x_i < x_{i+\frac{1}{2}} < x_{i+1} < \dots < x_{N+\frac{1}{2}} = x_{N+1} = 1.$$

On introduit alors les pas de discrétisation

$$h_i = |K_i| = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$$

$$h_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i$$

3.2.2 Formulation en volumes finis

On considère les approximations u_i [12] de la solution u de (3.4) dans chaque cellule K_i , on a donc N inconnues. Plus précisément, u_i est une approximation de

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

la valeur moyenne de u dans K_i :

$$u_i \simeq \frac{1}{|K_i|} \int_{K_i} u(x) dx \simeq \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(x) dx \quad \text{pour } 1 \leq i \leq N$$

On intégré alors l'équation différentielle de 3.4 sur chaque cellule K_i . on à

$$\begin{aligned} \int_{K_i} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} dx - \int_{K_i} E u(x) dx &= \int_{K_i} f(x) dx \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} dx - E \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(x) dx &= \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x) dx \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial u(x)}{\partial x} \right]_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} - E \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(x) dx &= \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(x) dx \end{aligned}$$

Ce qui donne

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial u(x_{i+\frac{1}{2}})}{\partial x} - \frac{\partial u(x_{i-\frac{1}{2}})}{\partial x} \right] - E h_i u_i = h_i f_i \quad (3.5)$$

où f_i désigne la valeur moyenne de f dans K_i , i.e : $f_i = \frac{1}{h_i} \int_{K_i} f(x) dx$

La quantité $-u'(x_{i+\frac{1}{2}})$ (resp. $-u'(x_{i-\frac{1}{2}})$) représente le flux[12] rentrant (resp. flux sortant) associé à la cellule K_i , ou point $x = x_{i-\frac{1}{2}}$ (resp. $x = x_{i+\frac{1}{2}}$), on approche le flux $-u'(x_{i+\frac{1}{2}})$ par différences décentrées :

$$-u'(x_{i+\frac{1}{2}}) \simeq -\frac{u(x_{i+\frac{1}{2}}) - u(x_i)}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_i} \quad \text{ou} \quad -u'(x_{i+\frac{1}{2}}) \simeq -\frac{u(x_{i+\frac{1}{2}}) - u(x_{i+1})}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i+1}} \quad (3.6)$$

Les approximations (3.6) traduisant la consistance de flux numérique. De fait des décentrement, il s'agit d'approximation d'ordre $\theta(h)$ avec $h = \max(h_i)$. Au point $x = x_{i+\frac{1}{2}}$, on introduit les flux numérique $F_{i+\frac{1}{2}}^-$ associée à la cellule K_i et $F_{i+\frac{1}{2}}^+$ associée à la cellule K_{i+1} :

$$F_{i+\frac{1}{2}}^- = -\frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_i}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_i}, \quad F_{i+\frac{1}{2}}^+ = -\frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i+1}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i+1}} \quad (3.7)$$

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

On impose alors la conservation des flux numérique a trouvée les points $x = x_{i+\frac{1}{2}}$:

$$F_{i+\frac{1}{2}}^- = F_{i+\frac{1}{2}}^+ \quad (3.8)$$

Cette condition corresponde à la continuité du flux (exacte) $-u'$ en $x = x_{i+\frac{1}{2}}$. En combinant (3.7) avec (3.8), on obtient :

$$F_{i+\frac{1}{2}}^- = F_{i+\frac{1}{2}}^+ = -\frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} = -\frac{u_{i+1} - u_i}{h_{i+\frac{1}{2}}} \quad (3.9)$$

le schéma numérique correspondant à la approximation de (3.5) par (3.6) avec (3.9) s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{(u_{i+1} - u_i)}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{(u_i - u_{i-1})}{h_{i-\frac{1}{2}}} \right] - E h_i u_i &= h_i f_i \quad \text{pour } 1 \leq i \leq N \\ \left(\frac{\hbar^2}{2m h_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{\hbar^2}{2m h_{i-\frac{1}{2}}} - E \right) h_i u_i + \left(-\frac{\hbar^2}{2m h_{i+\frac{1}{2}}} \right) u_{i+1} + \left(-\frac{\hbar^2}{2m h_{i-\frac{1}{2}}} \right) u_{i-1} &= h_i f_i \end{aligned}$$

3.2.3 Système linéaire

On regrouper les N inconnues dans les [12] vecteurs $u = (u_1, \dots, u_N)^T$ et on note $b = (b_1, \dots, b_N)^T$ avec $b_i = h_i f_i$.

Soit A la matrice de taille $N \times N$ définie par :

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \beta_{N-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \beta_{N-1} & \alpha_N \end{pmatrix}$$

avec

$$\alpha_i = \frac{\hbar^2}{2m h_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{\hbar^2}{2m h_{i-\frac{1}{2}}} - E h_i$$

$$\text{et } \beta_i = -\frac{\hbar^2}{2m h_{i+\frac{1}{2}}}, \beta_{i-1} = -\frac{\hbar^2}{2m h_{i-\frac{1}{2}}}$$

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

calculer b_i :

$$b_i = h_i f_i = \int_{x_i - \frac{1}{2}}^{x_i + \frac{1}{2}} f(x) dx$$

On pose

$$f(x) = \left(\frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} - E \right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$$

$$b_i = \int_{x_i - \frac{1}{2}}^{x_i + \frac{1}{2}} \left(\frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} - E \right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) dx$$

$$b_i = \left(\frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} - E \right) \left(-\frac{L}{2\pi} \right) \left[\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \right]_{x_i - \frac{1}{2}}^{x_i + \frac{1}{2}}$$

$$b_i = \left(\frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} - E \right) \left(-\frac{L}{2\pi} \right) \left(\cos\left(\frac{2\pi}{L}\left(x_i + \frac{1}{2}\right)\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{L}\left(x_i - \frac{1}{2}\right)\right) \right)$$

3.3 Résolution numérique

on reçoit les résultats des programmes en Matlab pour résolution numérique de la solution pour le problème :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) - Eu(x) = \left(\frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} - E \right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) & 0 < x < 2\pi \\ u(0) = u(2\pi) = 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

On a comme solution exacte $u(x) = \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$ car elle vérifie les conditions de notre problème.

On utilise comme constantes :

$$m = 9.11e - 31$$

$$K = 1.602e - 19$$

$$E = h^2 * K^2 / (2 * m)$$

$$E1 = h^2 / (2 * m)$$

- La figure (3.3) représente la comparaison entre la solution calculer par éléments finis et solution exacte pour les maillages 50, 100, 150 et 200.

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

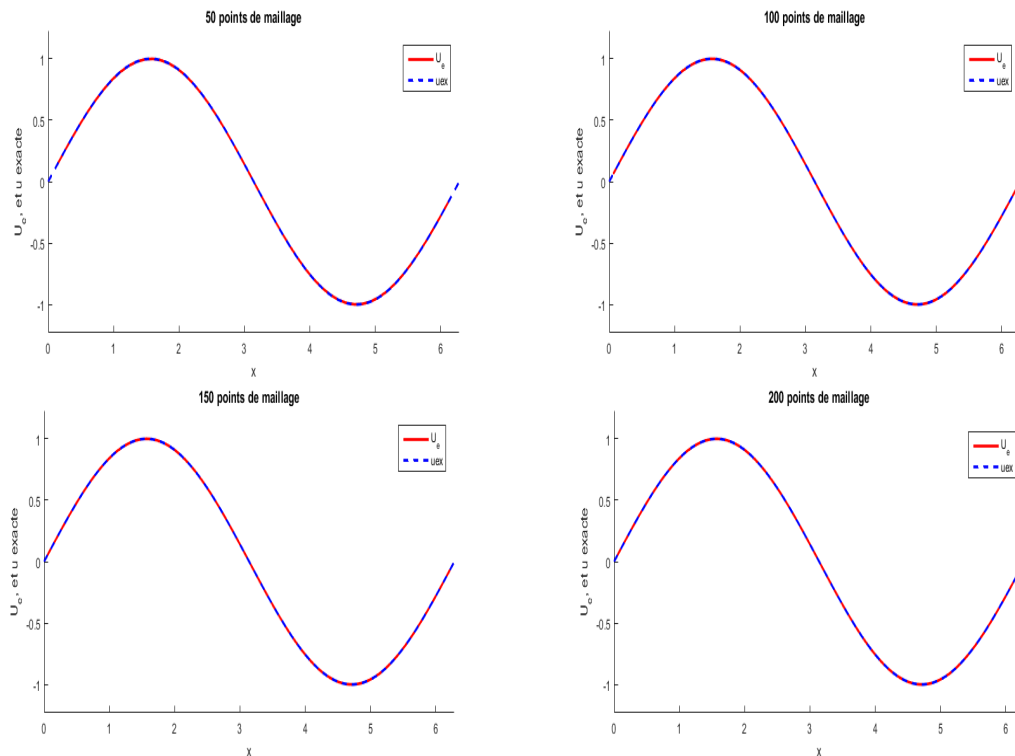


FIGURE 3.3 – comparaisons entre la solution calculer par éléments finis et solution exacte pour les maillages 50, 100, 150 et 200

* On remarquons que les quartes courbes sont presque le même, toute fois que on augment les nombres des points des maillage les deux courbes sont pleinement uniformes.

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

- la figure (3.4) représente la comparaisons entre la solution calculer par volume finis et solution exacte pour les maillages 50, 100, 150 et 200.

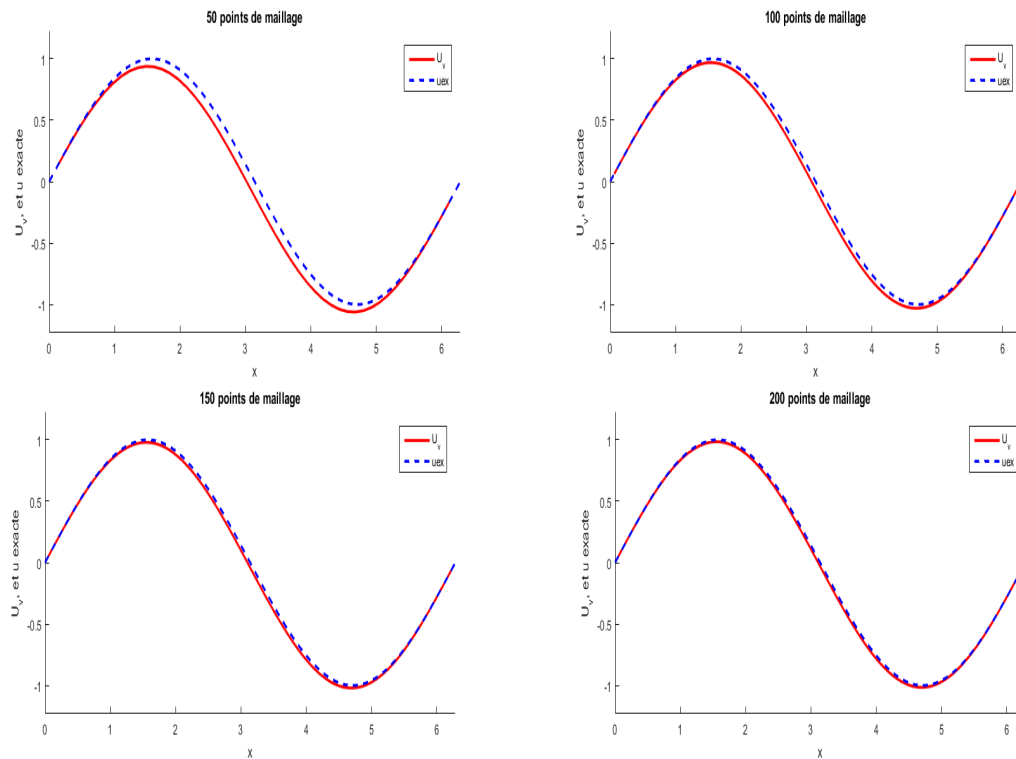


FIGURE 3.4 – comparaisons entre la solution calculer par volume finis et solution exacte pour les maillages 50, 100, 150 et 200

- * On remarquons avec l'augmentation des nombres des maillage les deux courbes sont plus proches.

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

* On définit la norme entre la solution exacte u_{ex} et la solution calculée par la méthode de élément finis $U1$ comme suit :

$$Nnorm_e = \|U1 - u_{ex}\|$$

• La figure(3.5) représente La norme entre la solution exacte et la solution calculée par la méthode de élément finis par rapport aux nombre des points de maillages.

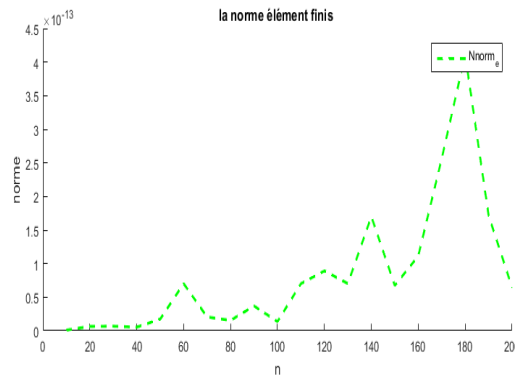


FIGURE 3.5 – La norme par rapport aux nombre des points de maillages

* On remarquons que on augment les points de maillage le courbe perturbe en croissante mais dans un voisinage de 10^{-13} qui tend vers zéro.

* On définit la norme entre la solution exacte u_{ex} et la solution calculée par la méthode de volume finis $U2$ comme suit :

$$Nnorm_v = \|U2 - u_{ex}\|$$

• La figure(3.6) représente La norme entre la solution exacte et la solution calculée par la méthode de volume finis par rapport aux nombre des points de maillages.

Application de la méthode des éléments finis et volumes finis sur l'équation de Schrödinger

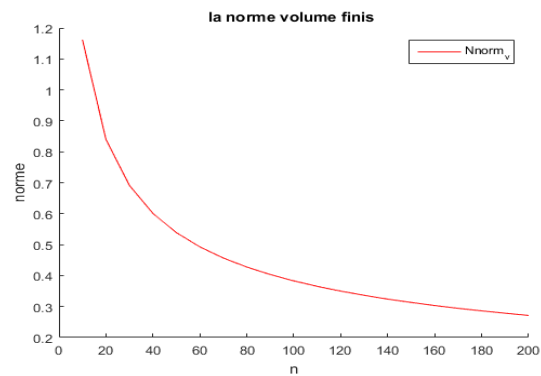


FIGURE 3.6 – La norme par rapport aux nombre des points de maillages

* on remarquons que la convergence de la norme tend vers zéro quant le pas de maillage converge vers zéro.

Conclusion

Les mathématiques utilisant couramment les notions d'infini et de continue. La solution exacte d'un problème différentielle aux dérivées partielles est une fonction continue.

Les ordinateurs ne connaissent que le fini et le discret, les solutions approchées seront calculées en définitive comme des collections de valeurs discrètes sous la forme de composantes d'un vecteur solution d'un problème matricielle. En vue d'un problème exact (continue) au problème approché (discret) on dispose de plusieurs techniques concourantes, dans ce mémoire on a traité l'équation de Schrödinger avec deux techniques : éléments finis, volumes finis et après la comparaison entre les deux solutions nous avons remarquons que l'utilisation de méthode élément fini en dimension 1 donne une solution plus proche à la solution exacte par contre la méthode volume fini. A la fin de ce travail on conclut que la méthode d'élément fini une technique plus confortable pour résoudre l'équation de Schrödinger. On peut résoudre ce problème avec l'élément de Lagrange en dimension 2 et 3... ect la même chose avec la méthode de volume fini.

Bibliographie

- [1] Robert Bédard. Equations aux dérivées partielles. *l'université du Québec à mont-réal*, Mai 2003.
- [2] B.Helffer. Cours edp-romanie-2014 aux équations aux dérivées partielles, analyse de fourier et introduction aux distributions. *Université Paris sud version pour la Roumanie*, Février 2014.
- [3] Eric Blayo. Notes de cours sur la méthode des éléments finis.
- [4] Franck Boyer. Analyse numérique des edp elliptiques. *Master 2ième année - Mathématiques et Applications*, 1er décembre 2009.
- [5] Daniel Fredon et Michel Bridier. Mathématique pour les sciences de l'ingénieur dunod. *20 rue des Grands Augustins, 75006 Paris*, 2003.
- [6] Claire David et pierre Gosselet. Equations aux dérivées partielles. *Cours et exercices corrigés 2ème édition, Dunod, 5 rue Laromiguière, 75005 Paris*, 2015.
- [7] Jean Michel Bony et Yuon Martel. Analyse de fourier, analyse spectrale et équations aux dérivées partielles. 2012.
- [8] Michel KERN. Introduction à la méthode des éléments finis. *Ecole Nationale supérieure des mines de paris*, 2004-2005.
- [9] A. Lesfari. Introduction aux équations aux dérivées partielles (edp)., 2014-2017.
- [10] Hervé Reinhard. Équations aux dérivées partielles, introduction. *Dunod, 20 rue des Grands Augustins, 75006 Paris*, 2001.

BIBLIOGRAPHIE

[11] J-H SAIAC. Méthode des éléments finis. 8 juin 2006.

[12] J-F Scheid. volumes finis. 2017-2018.

[13] Eric Goncalvés De Silva. Méthode et analyse numérique. 18 Jan 2011.

Table des figures

2.1	Élément finis de Lagrange 2D : triangulaire P_1 , triangulaires P_2 et rectangulaire Q_1	30
2.2	Élément finis de Lagrange tridimensionnels : tétraédrique P_1 et P_2 , parallélépipédique Q_1 et prismatique	31
2.3	Élément triangulaire d'Hermite cubique, éléments d'Argyris et l'élément rectangulaire Q_3	36
3.1	Discrétisation (maillage)du segment $[0;L]$ en éléments finis P1 . . .	40
3.2	Fonction de base de Lagrange de P_1	41
3.3	comparaisons entre la solution calculer par éléments finis et solution exacte pour les maillages 50, 100, 150 et 200	52
3.4	comparaisons entre la solution calculer par volume finis et solution exacte pour les maillages 50, 100, 150 et 200	53
3.5	La norme par rapport aux nombre des points de maillages	54
3.6	La norme par rapport aux nombre des points de maillages	55