Mini-projet d'analyse numérique du cours MAP 411
Résolution par éléments finis d'une équation de Schrödinger

Sujet proposé par Eric Cancès (cances@cermics.enpc.fr)

On considère l'équation de Schrödinger suivante sur le domaine $\Omega =]-R, R[$:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\dfrac{d^2\psi}{dx^2}(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \\ \\ \psi(-R) = \psi(R) = 0 \\ \\ \displaystyle\int_{-R}^{R} |\psi(x)|^2 \, dx = 1 \end{array} \right. \qquad \text{où} \qquad V(x) = \left\{ \begin{array}{ll} V_0 & \text{si } |x| \leq a, \\ 0 & \text{si } a \leq |x| \leq R, \end{array} \right. \tag{1}$$

avec $V_0 < 0$ et $0 < a < R$. Les inconnues de ce problème sont la fonction d'onde $\psi : \Omega \to \mathbb{R}$ et l'énergie $E \in \mathbb{R}$. Le potentiel V dans (1) est appelé, pour des raisons évidentes, "trou de potentiel". Ce trou peut être plus ou moins profond, et plus ou moins large (ce sont respectivement les paramètres V_0 et a qui permettent ces réglages).

Notez que l'énergie E peut être interprétée comme une valeur propre de l'Hamiltonien sous-jacent H. On peut montrer (voir cours MAP 431) qu'il existe une suite strictement croissante $(E_m)_{m\in\mathbb{N}^*}$ de réels tendant vers $+\infty$ et une base orthonormale $(\psi_m)_{m\in\mathbb{N}^*}$ de $L^2(\Omega)$ telle que le couple (ψ_m, E_m) soit solution de (1) pour tout $m \in \mathbb{N}^*$. Il en résulte en particulier que les valeurs propres $E_1 < E_2 < \cdots$ de l'Hamiltonien H sont non dégénérées.

On considère l'espace de fonctions

$$\mathcal{V} = \left\{ \psi \in C^1([-R, R]) \mid \psi(-R) = \psi(R) = 0 \right\},$$

et on pose

$$\begin{aligned} \forall (\phi, \psi) \in \mathcal{V} \times \mathcal{V}, \quad (\phi, \psi)_{\mathcal{V}} &= \int_{-R}^{R} \phi(x)\psi(x) \, dx + \int_{-R}^{R} \phi'(x)\psi'(x) \, dx, \\ \mathcal{A}(\phi, \psi) &= \int_{-R}^{R} \phi'(x)\psi'(x) \, dx + \int_{-R}^{R} V(x)\phi(x)\psi(x) dx, \\ \mathcal{E}(\psi) &= \mathcal{A}(\psi, \psi). \end{aligned}$$

Question 1. Vérifier que $\mathcal{V}$ est un espace vectoriel et que $(\cdot,\cdot)_{\mathcal{V}}$ définit un produit scalaire sur $\mathcal{V}$. On note $\|\cdot\|_{\mathcal{V}}$ la norme associée à ce produit scalaire.

Muni du produit scalaire $(\cdot,\cdot)_{\mathcal{V}}$, $\mathcal{V}$ est un espace pré-hilbertien, mais n'est pas un espace de Hilbert (il n'est pas complet pour la norme $\|\cdot\|_{\mathcal{V}}$). Néanmoins, on fera comme si, et on utilisera dans la suite les résultats d'optimisation du cours valables pour les espaces de Hilbert. Pour être rigoureux, il faudrait travailler non pas avec l'espace $\mathcal{V}$, mais avec son complété de Cauchy, qui se trouve être l'espace de Sobolev $H_0^1(\Omega)$. Les espaces de Sobolev seront étudiés dans le cours MAP 431.

Question 2. Montrer que $\mathcal{A}$ est une forme bilinéaire continue sur $\mathcal{V}$ et qu'il existe $\gamma \in \mathbb{R}_+^*$ et $C \in \mathbb{R}$ tel que

$$\forall \psi \in \mathcal{V}, \quad \mathcal{E}(\psi) \geq \gamma \|\psi\|_{\mathcal{V}}^2 - C\|\psi\|_{L^2}^2,$$

où on rappelle que $\|\psi\|_{L^2} = \left(\int_{-R}^{R} |\psi(x)|^2 \, dx \right)^{1/2}$.

Question 3. Montrer que la fonction $\mathcal{E} : \mathcal{V} \to \mathbb{R}$ est différentiable sur $\mathcal{V}$ et qu'il en est de même de la fonction $g : \mathcal{E} \to \mathbb{R}$ définie par

$$\forall \psi \in \mathcal{V}, \quad g(\psi) = \int_{-R}^{R} |\psi(x)|^2 \, dx - 1.$$

Etablir les équations d'Euler-Lagrange associées au problème d'optimisation sous contrainte

$$\inf_{\psi \in \mathcal{V}} \left\{ \mathcal{E}(\psi) \;\middle|\; \int_{-R}^{R} |\psi(x)|^2 \, dx = 1 \right\}. \tag{2}$$

Montrer par un raisonnement formel (sans justifier rigoureusement les intégrations par parties) que les solutions de ces équations d'Euler-Lagrange sont en fait les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire (1). Dans le langage de l'optimisation, que représentent l'état fondamental et les états excités de l'Hamiltonien H vis-à-vis du problème (2) ?

Question 4. En remarquant que si E est donnée, les solutions de (1) peuvent être calculées explicitement, montrer que les énergies E_m sont les racines d'une équation de la forme $f(E) = 0$ où f est une fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$ que l'on précisera. En déduire une méthode de calcul numérique des valeurs propres de (1) et l'implémenter en Python. Donner des valeurs approchées à 10^{-10} près des deux premières valeurs propres E_1 et E_2 pour le cas où $a = 1$, $R = 5$ et $V_0 = -6$.

Cette méthode de résolution de l'équation de Schrödinger (1) n'est pas généralisable au cas où V n'est pas constant par morceaux, ni *a fortiori* au cas où Ω est un ouvert borné quelconque de dimension $d \geq 2$. On va maintenant étudier une méthode de résolution basée sur la méthode des éléments finis qui, elle, se généralise au cas d'un potentiel plus général et d'un ouvert Ω de dimension $d \leq 3$.

On se donne un entier $N \geq 2$ et on découpe l'intervalle $[-R, R]$ en N segments $[x_i, x_{i+1}]$, $0 \leq i \leq N-1$, avec $x_i = -R + ih$ et $h = 2R/N$. On obtient ainsi un maillage uniforme de Ω. On note $N_h = N - 1$ le nombre de nœuds intérieurs, $\mathcal{V}_h$ l'espace d'approximation construit à partir de ce maillage et des éléments finis $\mathbb{P}_1$, et $(\phi_i)_{1\leq i\leq N_h}$ la base canonique de $\mathcal{V}_h$. Pour simplifier le calcul des intégrales, on supposera que N est pair et que a est un multiple entier de h. Dans les applications numérique, on prendra $a = 1$, $R = 5$ et $N = 10 \times k$ avec $k \in \mathbb{N}^*$.

Les matrices de rigidité et de masse sont respectivement

$$A_{N_h} = \left(\int_{-R}^{R} \varphi_i' \varphi_j' + V \varphi_i \varphi_j \right)_{1\leq i,j\leq N_h}, \qquad M_{N_h} = \left(\int_{-R}^{R} \varphi_i \varphi_j \right)_{1\leq i,j\leq N_h}.$$

Question 5. Montrer que résoudre l'approximation variationnelle

$$\inf_{\psi_h \in \mathcal{V}_h} \left\{ \mathcal{E}(\psi_h) \;\middle|\; \int_{-R}^{R} |\psi_h(x)|^2 \, dx = 1 \right\} \tag{3}$$

du problème d'optimisation (2) dans l'espace $\mathcal{V}_h$ revient à résoudre le problème d'optimisation

$$\inf_{X \in \mathbb{R}^{N_h}} \left\{ X^T A_{N_h} X \;\middle|\; X^T M_{N_h} X = 1 \right\}. \tag{4}$$

Ecrire les équations d'Euler-Lagrange associées au problème (3) et montrer que les équations d'Euler-Lagrange associées au problème (4) s'écrivent

$$A_{N_h} X_{N_h} = E_h M_{N_h} X_{N_h}, \qquad X_{N_h} \in \mathbb{R}^{N_h}, \qquad X_{N_h}^T M_{N_h} X_{N_h} = 1. \tag{5}$$

Calculer explicitement les valeurs des coefficients des matrices A_{N_h} et M_{N_h}.

Question 6. Vérifier que la matrice M_{N_h} est définie positive et que le problème (6) est équivalent au problème

$$\widetilde{A}_{N_h} Y_{N_h} = E_h Y_{N_h}, \qquad Y_{N_h} \in \mathbb{R}^{N_h}, \qquad Y_{N_h}^T Y_{N_h} = 1, \tag{6}$$

où $\widetilde{A}_{N_h}$ est une matrice carrée symétrique que l'on précisera. Les valeurs propres E_h peuvent donc s'obtenir en diagonalisant la matrice symétrique $\widetilde{A}_{N_h}$. On note $E_{1,h} \leq E_{2,h} \leq ...$ ces valeurs propres, comptées avec leurs multiplicités, qui sont en nombre fini N_h. Expliquer comment relier les points critiques du problème (3) aux vecteurs propres de $\widetilde{A}_{N_h}$.

Question 7. Montrer successivement les assertions suivantes :

1. on a l'inégalité $E_1 \leq E_{1,h}$. On admettra qu'on a également $E_m \leq E_{m,h}$ pour $m \geq 2$;

2. pour tout entier $p \geq 1$, on a $E_{1,\frac{h}{p}} \leq E_{1,h}$. On admettra que cette propriété reste vraie pour $m \geq 2$;

3. on a $E_{m,h} - E_m = \mathcal{E}(\psi_{m,h} - \psi_m) - E_m \|\psi_{m,h} - \psi_m\|_{L^2}^2$, où $\psi_{m,h}$ est un point critique de (3) associé à $E_{m,h}$.

En admettant qu'il existe $c_m \in \mathbb{R}_+^*$ et un point critique $\psi_{m,h}$ de (3) associé à $E_{m,h}$ tel que $\|\psi_{m,h} - \psi_m\|_{\mathcal{V}} \leq c_m h$, montrer qu'il existe $C_m \in \mathbb{R}_+^*$ tel que $0 \leq E_{m,h} - E_m \leq C_m h^2$.

Question 8. Ecrire un code Python permettant de calculer les valeurs propres $E_{1,h}$ et $E_{2,h}$. Pour $a = 1$, $R = 5$, $V_0 = -6$ et $N = 10 \times k$ avec $k \in \mathbb{N}^*$ (i.e. $h = 1/k$), comparer ces valeurs aux valeurs propres E_1 et E_2 calculées à la question 4. Pour $m = 1$ et $m = 2$, vérifier que $E_{m,h} - E_m \sim C_m h^2$ et donner la valeur de C_m observée en pratique. Etudier également le nombre de valeurs propres négatives en fonction de h.

Question 9. La diagonalisation de la matrice $\widetilde{A}_{N_h}$ est à la fois très longue et inutile si on ne s'intéresse qu'à la première valeur propre $E_{1,h}$. Une méthode alternative repose sur la minimisation de l'énergie. Etant donné un paramètre $\alpha > 0$, on considère pour ce faire l'algorithme suivant (gradient projeté sur la sphère) :

$$\widetilde{X}^{n+1} = X^n - \alpha A_{N_h} X^n, \qquad \frac{1}{c^{n+1}} = \left(\widetilde{X}^{n+1}\right)^T M_{N_h} \widetilde{X}^{n+1}, \qquad X^{n+1} = \sqrt{c^{n+1}}\, \widetilde{X}^{n+1}.$$

On part par exemple de $\widetilde{X}^0 = (1, \dots, 1)^T$ et donc de la condition initiale $X^0 = c^0 \widetilde{X}^0$ associée. Implémenter cet algorithme en Python. Etudier la convergence de l'énergie en fonction de α (y a-t-il convergence ou non, la convergence de l'erreur est-elle exponentiellement rapide, et pour quelle valeur de α cette convergence est la plus rapide ?). Comparer le vecteur propre obtenu et la valeur propre associée au vecteur propre et à la valeur propre trouvés par diagonalisation. Etudier l'influence du critère d'arrêt (énergie vs. différence entre les itérés). Tester aussi quelques autres conditions initiales.

Question 10. On note X_1^* le vecteur propre associé à la première valeur propre. La recherche de la seconde valeur propre se ramène au problème suivant :

$$\inf \left\{ X^T A_{N_h} X \;\middle|\; X \in \mathbb{R}^{N_h},\ X^T M_{N_h} X = 1,\ X^T M_{N_h} X_1^* = 0 \right\}.$$

Implémenter l'algorithme de gradient projeté

$$\widetilde{X}^{n+1} = X^n - \alpha A_{N_h} X^n, \qquad \widehat{X}^{n+1} = \widetilde{X}^{n+1} - \left[\left(\widetilde{X}^{n+1}\right)^T M_{N_h} X_1^* \right] X_1^*,$$

$$\frac{1}{c^{n+1}} = \left(\widehat{X}^{n+1}\right)^T M_{N_h} \widehat{X}^{n+1}. \qquad X^{n+1} = \sqrt{c^{n+1}}\, \widehat{X}^{n+1}.$$

On prendra garde à appliquer les contraintes (notamment celle d'orthogonalisation) à la condition initiale, avant de débuter les itérations. Etudier et tester la convergence comme à la question précédente.