



Projet : Boites quantiques

Guillaume Henri
Montobbio Paul
Fialho Ugo

Encadrant: Pierre Tarrago, LPSM

Janvier 2024

Table des matières

1	Équation de Schrödinger sur \mathbb{R}^d, méthode des éléments finis	2
1.1	Reformulation du problème	2
1.2	Approximation de Ritz–Galerkin, fonctions test	3
1.2.1	Construction des fonctions test	3
1.3	Construction d’un maillage, triangulation de Delaunay	5
1.4	Formulation matricielle du problème	6
1.5	Calcul des coefficients	7
1.5.1	Calcul des coefficients de M	8
1.5.2	Calcul des coefficients de K	9
1.6	Gestion des conditions au bord et résolution	10
1.7	Convergence	11
	Bibliographie	12

Chapitre 1

Équation de Schrödinger sur \mathbb{R}^d , méthode des éléments finis

On s'intéresse toujours à l'équation $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, mais on cherche désormais à trouver une solution approchée. Pour cela on va la résoudre sur un ouvert Ω borné (de \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3), que l'on va subdiviser en éléments finis par un "maillage" ou "mesh". On va ensuite définir un ensemble de fonctions très simples correspondant à ces éléments, qui constitueront une "base" approximative des fonctions sur notre espace. On essaiera à partir de cette étape d'obtenir des informations sur les solutions de l'équation de Schrödinger.

1.1 Reformulation du problème

Notre problème $\hat{H}\psi(x) - E\psi(x) = 0$ peut se reformuler de la façon suivante:

Pour toute fonction v suffisamment lisse:

$$\langle \hat{H}\psi - E\psi, v \rangle = \int_{\Omega} (\hat{H}\psi - E\psi)v = 0 \quad (1.1)$$

L'espace des fonctions v sur Ω (que l'on appellera *fonctions test*) qui nous permettent de vérifier cette propriété est un espace vectoriel (appelé *espace de Sobolev*) qui a le mauvais goût d'être de dimension infinie. C'est là que l'approximation rentre en jeu.

1.2 Approximation de Ritz–Galerkin, fonctions test

Comme il nous est impossible de travailler avec une base de notre espace de Hilbert, nous allons nous contenter d'un sous espace vectoriel (qu'on notera V) engendré par une base de fonctions test relativement simples (que l'on notera $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$). Un choix typique est le choix de fonctions à support compact, linéaires par morceaux *i.e* des chapeaux.

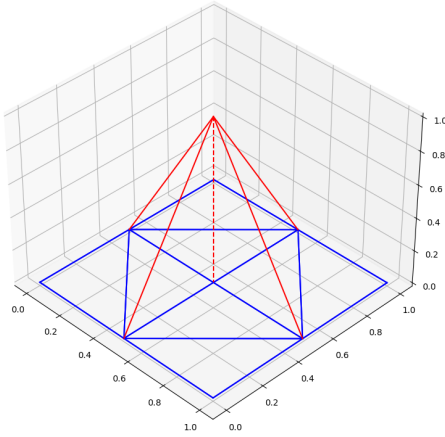


Figure 1.1: Une fonction test sur un mail-
lage simple dans \mathbb{R}^2

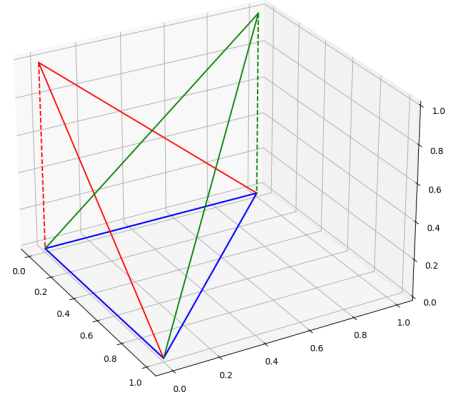


Figure 1.2: Deux fonctions test dont les
supports ont un simplexe en commun

Notre solution ψ approximée vérifiera donc (1.1) pour toute fonction $v \in V$. Par linéarité du produit scalaire, il suffit de vérifier l'égalité sur les vecteurs de la base:

$$\forall i \in \{1, \dots, n\} : \langle \hat{H}\psi - E\psi, v_i \rangle = \int_{\Omega} (\hat{H}\psi - E\psi)v_i = 0 \quad (1.2)$$

1.2.1 Construction des fonctions test

On présentera le cas d'un maillage de \mathbb{R}^2 , le cas d'un maillage de \mathbb{R}^3 est similaire. Soit p_1 un noeud de notre maillage, la fonction test v associée à p_1 devra valoir 1 sur ce point, 0 en dehors des simplexes connectés à p_1 , et être linéaire sur chaque simplexe. Soient p_2, p_3 deux voisins de p_1 , tels que $\{p_1, p_2, p_3\}$ appartiennent tous à un même simplexe. Le graphe de v sera le plan F de \mathbb{R}^3 défini par les points $(p_2, 0)$, $(p_3, 0)$ et $(p_1, 1)$ (où $(p, t) = (p_x, p_y, t)$). Avec ces notations, pour $x \in \mathbb{R}^2$ $v(x)$ sera la hauteur de la projection de $(x, 0)$ sur F , de sorte à avoir $(x, v(x)) \in F$

On a donc $\det \begin{pmatrix} (p_1, 1) - (p_3, 0) \\ (p_2, 0) - (p_3, 0) \\ (x, v(x)) - (p_3, 0) \end{pmatrix} = 0$

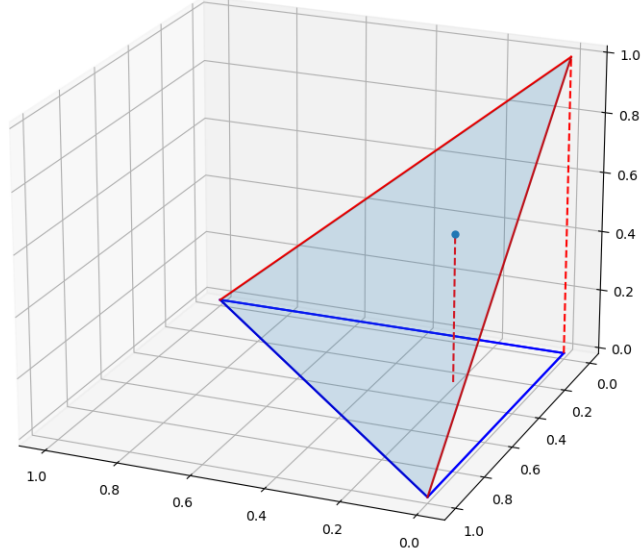


Figure 1.3: L'image d'un point de \mathbb{R}^2 dans le simplexe est sa projection sur la surface bleue par rapport à l'axe vertical

Ce qui après développement du déterminant nous donne:

$$v(x) = \frac{(p_{2y} - p_{3y})(x_1 - p_{3x}) - (p_{2x} - p_{3x})(x_2 - p_{3y})}{(p_{1x} - p_{3x})(p_{2y} - p_{3y}) - (p_{1y} - p_{3y})(p_{2x} - p_{3x})} \quad (1.3)$$

et, en notant le dénominateur précédent C ,

$$\nabla v(x) = \frac{1}{C} \begin{pmatrix} p_{2y} - p_{3y} \\ p_{3x} - p_{2x} \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

1.3 Construction d'un maillage, triangulation de Delaunay

Pour discrétiser notre espace de fonctions sur Ω , il nous faut dans un premier temps discrétiser Ω par un maillage, sur lequel on pourra ensuite définir nos fonctions chapeau. On entend par maillage la donnée d'un ensemble fini $\{p_i\}_{i \in I}$ de points de Ω et d'un ensemble du type (p_i, p_j) d'arêtes entre ces points. Pour simplifier ce qui suit, on optera pour un maillage construit à partir de simplexe, *i.e* de maillages triangulaires pour \mathbb{R}^2 et tétraédriques pour \mathbb{R}^3 .

On demande de nos maillages les propriétés suivantes:

- Chaque point appartient à un simplexe
- Les arêtes ne s'intersectent pas.

Il existe, pour constituer de tels maillages, un procédé appelé *triangulation de Delaunay* (*tétraédralisation de Delaunay* en trois dimensions), qui dépasse le cadre de ce rapport.

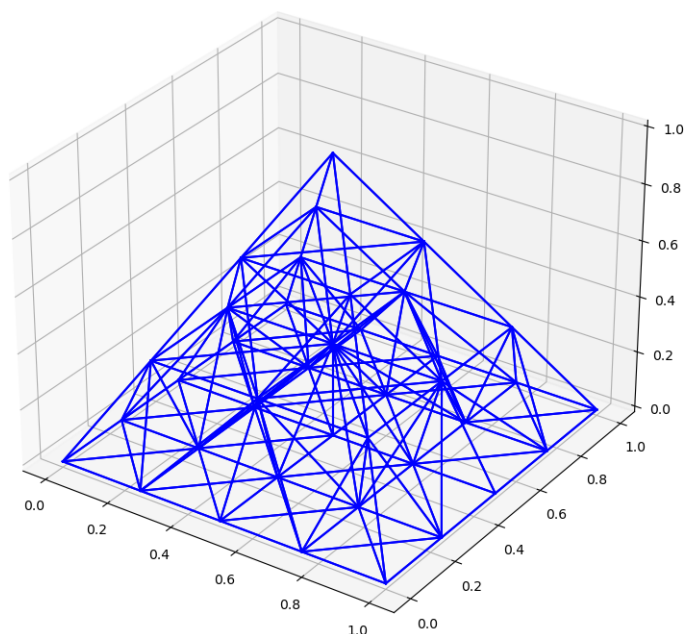


Figure 1.4: Un maillage d'une pyramide à partir de simplexes

1.4 Formulation matricielle du problème

Les informations fournies par la condition (1.2) nous laissant peu de choix, nous sommes contraints d'exprimer notre solution ψ dans la base V , *i.e.* $\psi = \sum_{k=1}^n \psi_k v_k$, où les ψ_k sont des scalaires. En réexprimant (1.2) avec ψ sous cette forme, on obtient par linéarité du produit scalaire:

$$\forall i \in \{1, \dots, n\} : \sum_{k=1}^n \psi_k \langle \hat{H} v_k, v_i \rangle = E \sum_{k=1}^n \psi_k \langle v_k, v_i \rangle \quad (1.5)$$

En posant $\vec{\psi} := (\psi_1, \dots, \psi_n)$, $K_{i,j} := \langle \hat{H} v_i, v_j \rangle$ et $M_{i,j} := \langle v_i, v_j \rangle$ on a:

$$K \cdot \vec{\psi} = E M \cdot \vec{\psi} \quad (1.6)$$

Les coefficients de ces matrices méritent toutefois un peu plus d'attention, notons les faits suivants:

- Lorsque deux noeuds ne sont pas voisins, leurs fonctions correspondantes v_i et v_j sont à supports disjoints et on a $\langle v_i, v_j \rangle = \int_{\Omega} v_i v_j = 0$ la matrice M est donc *creuse*
- La définition de l'opérateur \hat{H} nous permet d'exprimer les coefficients de K plus précisément, on a en effet:

$$K_{i,j} = \langle \Delta v_i, v_j \rangle + \langle V v_i, v_j \rangle \quad (1.7)$$

(*Nota Bene:* on comptera sur la sagacité du lecteur pour différencier l'espace vectoriel V et la fonction V qui a un point de Ω associe son potentiel).

Le second terme est relativement simple, étant donné qu'on considérera un potentiel V constant par morceaux (si ce n'est constant, dans le cas ou on n'étudie que l'intérieur du puits).

Occupons-nous du premier terme. On rappelle la formule de flux-divergence pour un champ vectoriel $X : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ régulier, et $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un ouvert \mathcal{C}^1 par morceaux :

$$\int_{\partial\Omega} \vec{X} \cdot d\vec{S} = \int_{\Omega} \text{div}(X) dx \quad (1.8)$$

On observe que, pour $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ régulière, on a :

$$\operatorname{div}(fX) = \sum_{i=1}^3 \partial_i(fX_i) = \sum_{i=1}^3 X_i \partial_i f + f \partial_i X_i = \nabla f \cdot X + f \operatorname{div}(X)$$

$\forall(i, j)$, on peut donc appliquer (1.8) à $v_j \nabla v_i$, et en remarquant que $\Delta f = \operatorname{div}(\nabla f)$, on obtient la première formule de Green :

$$\langle \Delta v_i, v_j \rangle = \int_{\Omega} v_j \Delta v_i \, dx = \int_{\partial\Omega} \overrightarrow{v_j \nabla v_i} \cdot d\vec{S} - \int_{\Omega} \nabla v_j \cdot \nabla v_i \, dx \quad (1.9)$$

Encore une fois, en se restreignant à un problème plus simple, on peut considérer que notre particule ne quitte jamais le puits (ce qui équivaut à un cas dégénéré où le potentiel hors du puits est infini). Dans ce cas on peut ajouter une condition supplémentaire sur ψ : cette dernière est de gradient nul sur la frontière $\partial\Omega$ de Ω .

Le lecteur ayant bien retenu le type de fonctions que l'on manipule sera en droit de lever la main pour demander si le laplacien Δv_i d'une fonction comme 1.3 n'est pas simplement nul, ce qui rendrait (1.9) absurde (le terme $\int_{\Omega} \nabla v_j \cdot \nabla v_i$ n'étant pas nécessairement nul). La réponse est la suivante: le laplacien n'est pas nul, il n'existe simplement pas, les fonctions test n'étant pas assez régulières au bords. Le cadre nécessaire pour donner un sens rigoureux à ce laplacien est celui des distributions, on se contentera donc d'utiliser l'expression (1.9) comme d'une IPP magique qui nous permet d'obtenir des informations sur le terme $\langle \Delta v_i, v_j \rangle$ pour constituer notre matrice K .

1.5 Calcul des coefficients

LASCIATE OGNE SPERANZA, VOI CH'INTRATE.

TOI QUI ENTRE ICI, ABANDONNE TOUT ESPOIR.

L'enfer, Dante

Cette section n'a que très peu d'intérêt d'un point de vue conceptuel, car il ne s'agit que de calculs très pénibles. Néanmoins, il est nécessaire de préciser certaines choses, de sorte à ne pas laisser une énorme boîte noire au milieu de notre résolution. Notons qu'il existe des méthodes générales pour intégrer n'importe quel polynôme sur un simplexe quelconque, on se référera à [4] pour ces dernières.

1.5.1 Calcul des coefficients de M

Soient s_i, s_j deux fonctions de la forme (1.3) dont le support commun est un simplexe S (Voir l'illustration 1.2. À partir de l'expression (1.3) et en notant p' le troisième point du simplexe en question on a :

$$s_i s_j = \frac{A(X_1, X_2)}{C} \quad (1.10)$$

Avec

$$C = [(p_{ix} - p'_x)(p_{jy} - p'_y) - (p_{iy} - p'_y)(p_{jx} - p'_x)] \cdot [(p_{jx} - p'_x)(p_{iy} - p'_y) - (p_{jy} - p'_y)(p_{ix} - p'_x)]$$

Et

$$\begin{aligned} A(X_1, X_2) &= [(p_{jy} - p'_y)(p_{iy} - p'_y)](X_1)^2 + [(p_{jx} - p'_x)(p_{ix} - p'_x)](X_2)^2 \\ &\quad - [(p_{jy} - p'_y)(p_{ix} - p'_x) + (p_{jx} - p'_x)(p_{iy} - p'_y)]X_1 X_2 \\ &\quad + [(p_{jy} - p'_y)((p_{ix} - p'_x)p'_y - (p_{iy} - p'_y)p'_x) + (p_{iy} - p'_y)((p_{jx} - p'_x)p'_y - (p_{jy} - p'_y)p'_x)]X_1 \\ &\quad - [(p_{jx} - p'_x)((p_{ix} - p'_x)p'_y - (p_{iy} - p'_y)p'_x) + (p_{ix} - p'_x)((p_{jx} - p'_x)p'_y - (p_{jy} - p'_y)p'_x)]X_2 \\ &\quad + [(p_{jy} - p'_y)(p_{iy} - p'_y)(p'_x)^2 - (p_{jy} - p'_y)(p_{ix} - p'_x)p'_y p'_x - (p_{iy} - p'_y)(p_{jx} - p'_x)p'_y p'_x + (p_{jx} - p'_x)(p_{ix} - p'_x)(p'_y)^2] \end{aligned}$$

NB: le calcul doit être refait pour s_i^2

Il s'agit donc d'intégrer une fonction polynomiale sur un domaine en forme de simplexe. On cherche à se ramener à un domaine d'intégration simple comme le suivant: Concrètement on opère une translation par le vecteur p_i et on fixe les points restants aux vecteurs de la base canonique par la transformation

$$T^{-1} := \begin{pmatrix} p'_x - p_{ix} & p_{jx} - p_{ix} \\ p'_y - p_{iy} & p_{jy} - p_{iy} \end{pmatrix}^{-1} \quad (1.11)$$

(la matrice qui exprime la base canonique dans la base $\{p' - p_i, p_j - p_i\}$ est l'inverse de ces vecteurs dans la base canonique). Il nous reste donc à savoir intégrer les fonctions polynomiales sur ce domaine, qu'on appelle *simplexe canonique*. Bien qu'on explicite le cas de l'intégration sur \mathbb{R}^2 , cette méthode fonctionne bien entendu en toute dimension. Si on

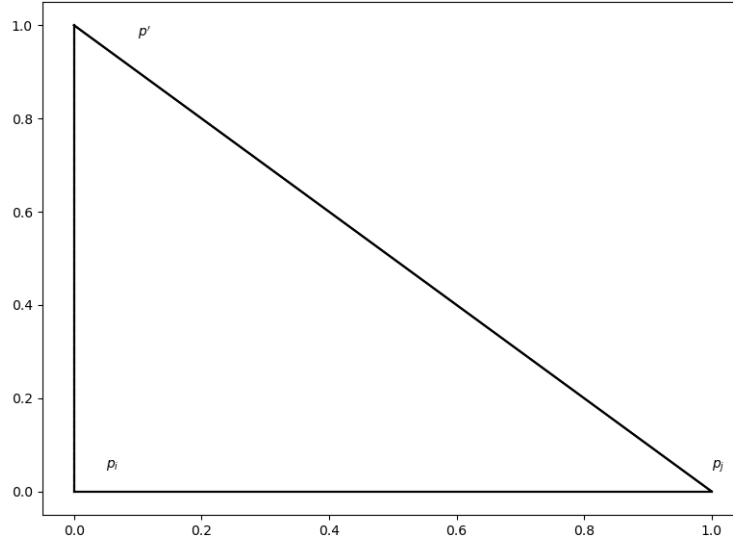


Figure 1.5: Le domaine d'intégration auquel on se ramène.

note $S(a, b, c)$ le simplexe engendré par trois points a, b, c de \mathbb{R}^2 , on a pour toute fonction f :

$$\int_{S(p_i, p_j, p')} f(X) = \int_{S(0_{\mathbb{R}^2}, e_1, e_2)} f(T \cdot X + p_i) |det(T)| \quad (1.12)$$

Il reste donc juste à intégrer nos monômes sur ce domaine, on a:

$$\int_{S(0_{\mathbb{R}^2}, e_1, e_2)} f(X) = \int_0^1 \int_0^{1-X_1} f(X_1, X_2) dX_2 dX_1 \quad (1.13)$$

Après beaucoup de calculs rigoureux (il faut faire attention, une fois qu'une erreur s'immisce, elle est difficile à trouver), on obtient une formule pour nos coefficients $M_{i,j}$, qu'il ne reste qu'à implémenter. Bien entendu, au vu de la définition de M , il est évident que cette dernière est symétrique.

1.5.2 Calcul des coefficients de K

On déduit de (1.4) qu'on a qu'à intégrer une fonction constante (on s'y attendait) sur chaque simplexe, *i.e* calculer un volume. On a donc:

$$K_{i,j} = \int_{S(p_i, p_j, p')} \nabla v_j \cdot \nabla v_i = \nabla v_j \cdot \nabla v_i \lambda(S(p_i, p_j, p')) \quad (1.14)$$

Où λ est la mesure de Lebesgue.

1.6 Gestion des conditions au bord et résolution

Une fois les matrices M et K constituées, il reste à imposer la condition de Dirichlet homogène. Pour cela, on réduit la taille du système (1.6) en retirant les lignes et colonnes correspondant aux points du bord $\partial\Omega$. Une fois le système résolu, on rajoutera des valeurs nulles à ces indices sur le vecteur propre.

Pour la résolution du problème de valeur propres généralisé (1.6), on cherche simplement les valeurs et vecteurs propres de $K \cdot M^{-1}$.

En écrivant $M = LL^T$ la décomposition de Cholesky de M , on obtient le système équivalent $L^{-1}K(L^T)^{-1}\psi = E\psi$, la différence étant qu'on cherche désormais les vecteurs et valeurs propres d'une matrice symétrique, ce qui peut avoir certains avantages en termes de calcul.

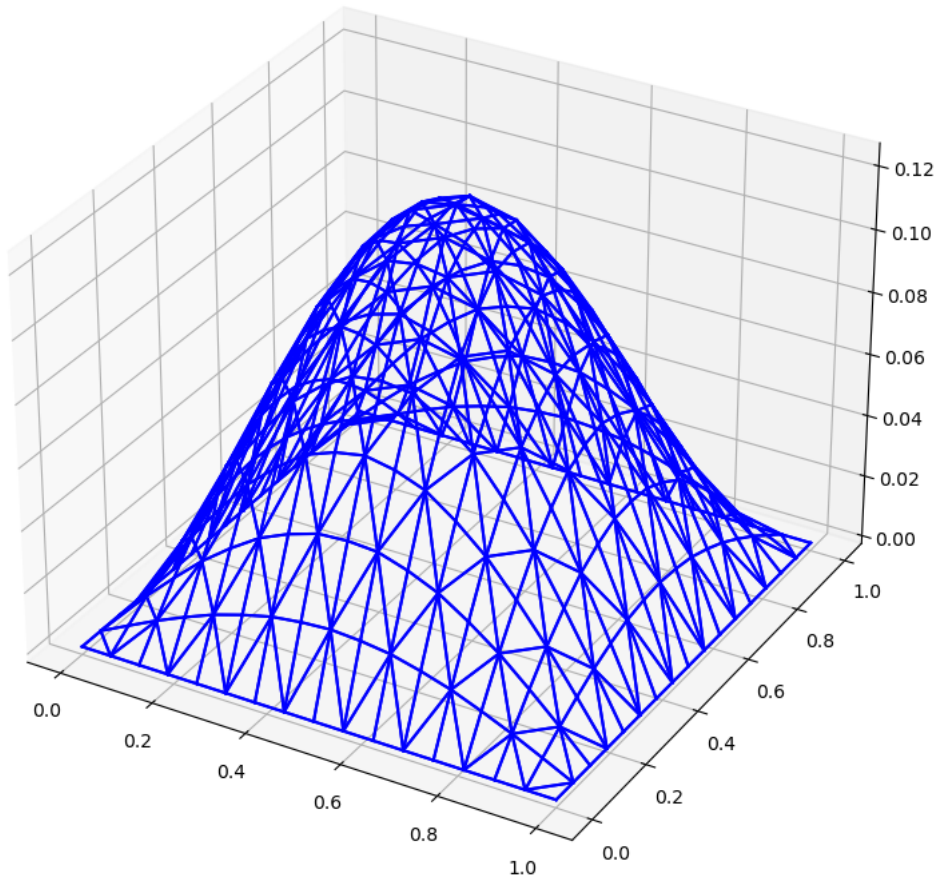


Figure 1.6: La solution $|\psi|$ de l'équation de Schrödinger sur un puits carré sans potentiel correspondant à la valeur propre de plus petit module

En s'intéressant au carré du module on peut maintenant obtenir une densité de probabilité pour notre particule: Pour traiter le cas d'un potentiel non nul, il suffit de déterminer un po-

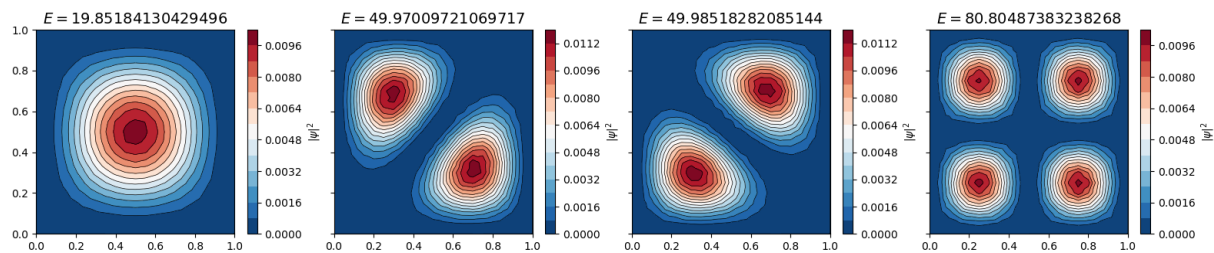


Figure 1.7: Les quatre premiers états dans un puits carré sans potentiel

tentiel $v_{i,j}$ pour chaque noeud du maillage, et de changer les coefficients $K_{i,j}$ en conséquence.

1.7 Convergence

La convergence de la méthode des éléments finis est particulièrement difficile à démontrer, et on reverra le lecteur à la page https://finite-element.github.io/L5_convergence.html pour plus de détails.

Bibliographie

[1] [QTC]

Brian C. Hall (2013) *Quantum Theory for Mathematicians*, Springer.

[2] [KWOK]

Kwok, Felix. (2018). *Numerical methods for spectral theory*.

[3] [COMP]

Mantashian GA, Mantashyan PA, Hayrapetyan DB. (2023) *Modeling of Quantum Dots with the Finite Element Method*, Computation.

[4] [SIMPLEX]

Jean B Lasserre. (2021) *Simple formula for integration of polynomials on a simplex*, BIT Numerical Mathematics.