

## TP1 : problème à l'équilibre thermique en 1D

Le but de ce TP est de calculer une approximation de l'équilibre thermique en 1D, dans le cas de conditions au bord de Dirichlet :

$$\begin{cases} \partial_{xx}\Psi(x) = \delta_n e^{\Psi(x)} - \delta_p e^{-\Psi(x)} - C(x) & x \in ]0, 1[, \\ n(x) = \delta_n e^{\Psi(x)}, \quad p(x) = \delta_p e^{-\Psi(x)} & x \in ]0, 1[, \\ \Psi(x=0) = \Psi_l^D, \quad \Psi(x=1) = \Psi_r^D. \end{cases} \quad (1)$$

Pour cela, on se donne une subdivision de  $]0, 1[$  en  $L$  mailles  $K_i = ]x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}[$  de longueur  $h_i$ . On note  $x_i$  le milieu de  $K_i$  et  $h_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i$ . On va implémenter le schéma numérique suivant :

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}} = h_i (\delta_n e^{\Psi_i} - \delta_p e^{-\Psi_i} - C_i), \quad i = 1, \dots, L, \quad (2)$$

avec le flux numérique

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{h_{i+\frac{1}{2}}},$$

et les conditions au bord

$$\Psi_0 = \Psi_l^D, \quad \Psi_{L+1} = \Psi_r^D.$$

Le schéma conduit donc à résoudre un système non-linéaire de  $L$  équations, qu'on peut écrire sous la forme suivante :

$$\mathbb{A}\Psi + b(\Psi) + b^D = 0, \quad (3)$$

où  $\Psi = (\Psi_1, \dots, \Psi_L)' \in \mathbb{R}^L$  est l'inconnue, la matrice  $\mathbb{A} \in M_{L,L}(\mathbb{R})$  est tridiagonale, définie par :

$$\mathbb{A}_{i,i-1} = -\frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}}, \quad \mathbb{A}_{i,i} = \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad \mathbb{A}_{i,i+1} = -\frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad i = 1, \dots, L, \quad (4)$$

la fonction  $b : \Psi \in \mathbb{R}^L \mapsto b(\Psi) \in \mathbb{R}^L$  est donnée par :

$$b(\Psi)_i = h_i (\delta_n e^{\Psi_i} - \delta_p e^{-\Psi_i} - C_i), \quad i = 1, \dots, L,$$

et le vecteur  $b^D = \left(-\frac{\Psi_l^D}{h_{\frac{1}{2}}}, 0, \dots, 0, -\frac{\Psi_r^D}{h_{L+\frac{1}{2}}}\right)' \in \mathbb{R}^L$  permet la prise en compte des conditions aux limites.

On doit donc résoudre l'équation non linéaire (2). On va pour cela utiliser la méthode de Newton.

### 1 Préliminaires

On propose dans cette partie quelques exercices préliminaires pour résoudre le problème à l'équilibre.

### Exercice 1 : Résolution d'une équation de Poisson

On souhaite calculer une solution approchée de l'équation de Poisson

$$\begin{cases} -u''(x) = f(x) & x \in ]0, 1[, \\ u(x=0) = u_l^D, & u(x=1) = u_r^D. \end{cases} \quad (5)$$

Ce problème s'écrit sous forme matricielle  $\mathbb{A}U = b$ , où  $\mathbb{A}$  est définie par (4), et  $b = \begin{pmatrix} h_1 f_1 + \frac{1}{h_{\frac{1}{2}}} u_l^D \\ h_2 f_2 \\ \vdots \\ h_{L-1} f_{L-1} \\ h_L f_L + \frac{1}{h_{L+\frac{1}{2}}} u_r^D \end{pmatrix}$ .

Écrire un algorithme permettant de résoudre ce système linéaire. On utilisera par exemple un algorithme permettant de calculer la décomposition LU d'une matrice et utilisant cette décomposition pour résoudre le système linéaire.

On pourra valider les résultats obtenus en les comparant par exemple dans le cas où  $f(x) = 1$  et  $u_l^D = u_r^D = 0$  avec la solution exacte donnée par  $u(x) = x(1-x)/2$ .

### Exercice 2 : Méthode de Newton (cas scalaire)

On va avoir besoin pour résoudre (3) d'appliquer la méthode de Newton dans le cas vectoriel (on a un système non linéaire de  $L$  équations à résoudre). On commence par implémenter cette méthode dans le cas scalaire pour s'en rappeler le principe.

La méthode de Newton est fondée sur le résultat suivant :

Soit  $f$  une fonction de classe  $C^2$  et  $a$  tel que  $f(a) = 0$  et  $f'(a) \neq 0$ . Alors  $a$  est un point fixe superattractif pour la fonction  $\varphi$ , définie sur un intervalle  $[a-r, a+r]$ ,  $r > 0$ , par :

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

On se donne une initialisation  $x_0$ , une tolérance d'arrêt  $\varepsilon$  sur la distance  $err$  entre 2 itérations successives (qu'on initialise à 1), et un nombre maximum d'itérations  $iter_{max}$ . L'algorithme est le suivant :

Tant que  $err > \varepsilon$  et  $i < iter_{max}$

$$x_{i+1} = x_i - f(x_i)/f'(x_i)$$

$$err = |x_{i+1} - x_i|$$

$$x_i = x_{i+1}$$

$$i = i + 1$$

Implémenter cet algorithme pour résoudre une équation  $f(x) = 0$ , où  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ . On pourra par exemple le tester avec  $f(x) = (x-1)(x+1)(x-3)$ , et tester le résultat obtenu avec différentes initialisations ( $x_0 = 0$ ,  $x_0 = -7$ ,  $x_0 = 5, \dots$ ).

## 2 Calcul d'une solution approchée de l'équilibre thermique

Écrire un algorithme permettant de calculer la solution  $\Psi$  du schéma (3). Il faut pour cela résoudre un système non linéaire de  $L$  équations. On utilisera la méthode de Newton, qui dans le cas vectoriel s'écrit de la manière suivante :

On cherche à résoudre  $f(x) = 0$ , où  $f : \mathbb{R}^L \rightarrow \mathbb{R}^L$  est de classe  $C^2$ . On se donne une initialisation  $x_0 \in \mathbb{R}^L$ . L'algorithme est le suivant :

Tant que  $err > \varepsilon$  et  $i < iter_{max}$

trouver  $y$  tel que  $Jf(x_i)y = f(x_i)$  (où  $Jf(x_i)$  est la Jacobienne de  $f$  au point  $x_i$ ),

calculer  $x_{i+1} = x_i - y$ ,

calculer  $err = \|x_{i+1} - x_i\|$

$x_i = x_{i+1}$

$i = i + 1$ .

À partir de cette solution  $\Psi$ , en déduire des approximations  $(n_i)_{i=1,\dots,L}$  et  $(p_i)_{i=1,\dots,L}$  des densités d'électrons et de trous à l'équilibre.