

État fondamental de l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique dans les domaines à coin.

Virginie BONNAILLIE

Université Paris-Sud, UMR 8628, Laboratoire de Mathématique, bât 425,
91405 ORSAY CEDEX

Virginie.Bonnaillie@math.u-psud.fr

Mots-clefs : Opérateur de Schrödinger, champ magnétique, domaines à coin, théorie spectrale, éléments finis, estimateurs a posteriori

Introduction

La supraconductivité, phénomène découvert en 1911, est la propriété que possèdent certains matériaux de conduire le courant électrique sans résistance à condition que leur température soit inférieure à une certaine température critique. Dès les premières expériences, les chercheurs ont mis en évidence l'existence d'un champ critique au dessus duquel la supraconductivité est détruite. Ginzburd et Landau ont décrit le comportement supraconducteur à l'aide des minimiseurs de la fonctionnelle :

$$\mathcal{G}(\psi, \mathcal{A}) = \int_{\Omega} \left(|(\nabla - i\kappa\mathcal{A})\psi|^2 + \kappa^2 |\operatorname{rot}\mathcal{A} - \mathcal{H}|^2 + \frac{\kappa^2}{2} (|\psi|^2 - 1)^2 \right) dx,$$

définie pour $\psi \in H^1(\Omega)$ et $\mathcal{A} \in H^1(\Omega)$. La fonction ψ , définie sur Ω à valeurs complexes, est appelée paramètre d'ordre, son module $|\psi|^2$ rend compte de la densité des paires d'électrons supraconducteurs. Le champ de vecteurs \mathcal{A} , défini sur \mathbb{R}^2 à valeurs dans \mathbb{R}^2 est le potentiel magnétique induit. Le paramètre $\kappa > 0$ est une constante caractéristique du matériel.

L'existence d'un minimiseur (ψ, \mathcal{A}) non trivial pour la fonctionnelle \mathcal{G} , qui traduit donc le fait que le matériau est supraconducteur, est étroitement liée à la valeur du bas du spectre de l'opérateur de Schrödinger avec un champ magnétique \mathcal{A} . En effet :

- Si $\mu_1(\kappa\sigma\mathbf{F}) < \kappa^2$, alors \mathcal{G} a un minimiseur non trivial.
- Inversement, si \mathcal{G} a un minimiseur non trivial $(\psi_{\kappa,\sigma}, \mathcal{A}_{\kappa,\sigma})$, alors $\mu_1(\kappa\mathcal{A}_{\kappa,\sigma}) < \kappa^2$.

Il est donc important d'étudier le bas du spectre de la réalisation de Neumann d'opérateurs du type $-(\nabla - i\mathcal{A})^2$. De nombreux papiers ont traité ce problème, on peut citer ceux de Bernoff-Sternberg [3], Lu-Pan [17, 18], Helffer-Mohamed [13, 14] pour des domaines réguliers, Jadallah [16], Pan [19] pour le quart de plan et Bonnaillie [5, 6] pour une étude plus systématique des domaines à coin.

Commençons par rappeler les résultats de l'étude théorique de tels opérateurs.

1 Opérateur de Schrödinger avec champ magnétique constant

Notons Ω un domaine de \mathbb{R}^2 à bord lipschitzien et ν la normale extérieure au bord du domaine $\Gamma = \partial\Omega$ quand elle est définie. Nous considérons $B\mathcal{A}_0 = \frac{B}{2} \begin{pmatrix} x_2 \\ -x_1 \end{pmatrix}$ le potentiel magnétique à champ magnétique constant d'intensité B . Nous nous intéressons à la réalisation de Neumann

de l'opérateur $-(\nabla - iB\mathcal{A}_0)^2$ sur Ω , que nous noterons $P_{B,\Omega}$. L'étude de trois domaines modèles, \mathbb{R}^2 , $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ et Ω_α où Ω_α est le secteur angulaire de \mathbb{R}^2 d'angle α :

$$\Omega_\alpha := \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R} \mid |x_2| < x_1 \tan \frac{\alpha}{2}\},$$

suffisent à donner une asymptotique du bas du spectre de la réalisation de Neumann de l'opérateur semi-classique $-(h\nabla - i\mathcal{A})^2$ sur un domaine non régulier quand $h \rightarrow 0$. Pour ce faire, il suffit d'utiliser une partition de l'unité et un C^1 -difféomorphisme local, pour se ramener localement à l'étude des trois modèles.

Définissons a_B la forme sesquilinéaire associée à $-(\nabla - iB\mathcal{A}_0)^2$:

$$a_B(u, v) = \int_{\Omega} (\nabla - iB\mathcal{A}_0)u \overline{(\nabla - iB\mathcal{A}_0)v} dx, \quad \forall u, v \in H_B^1(\Omega), \quad (1)$$

avec $H_B^1(\Omega) := \{u \in L^2(\Omega) \mid (\nabla - iB\mathcal{A}_0)u \in L^2(\Omega)\}$. L'opérateur $P_{B,\Omega}$ est défini sur :

$$\mathcal{D}_B^N := \{u \in L^2(\Omega) \mid (\nabla - iB\mathcal{A}_0)u \in L^2(\Omega), (\nabla - iB\mathcal{A}_0)^2 u \in L^2(\Omega), \nu \cdot (\nabla - iB\mathcal{A}_0)u|_{\Gamma} = 0\}.$$

Commençons par donner une propriété dite d'invariance de jauge :

Lemme 1 : Soit $\phi \in H^2(\Omega)$. Alors, les opérateurs $P_{B,\Omega}$ et $-(\nabla - i(B\mathcal{A}_0 + \nabla\phi))^2$ sont unitairement équivalents et les vecteurs propres se transportent par multiplication par $e^{i\phi}$.

Ce Lemme 1 montre donc que le spectre ne dépend que du potentiel magnétique et non du champ magnétique. Nous notons $\mu_B(\Omega)$ le bas du spectre de l'opérateur $P_{B,\Omega}$. Le principe du min-max exprime $\mu_B(\Omega)$ par :

$$\mu_B(\Omega) = \inf_{u \in H_B^1(\Omega), u \neq 0} \frac{a_B(u, u)}{\|u\|_{L^2(\Omega)}^2}. \quad (2)$$

Nous omettrons l'indice B quand nous considérons un champ d'intensité 1. Nous noterons $\mu(\alpha)$ le bas du spectre de P_{1,Ω_α} où α indique l'angle du secteur angulaire.

Pour des domaines invariants par dilatation, nous pouvons ramener l'étude de l'opérateur de Schrödinger à champ magnétique constant d'intensité B à celui d'intensité 1 :

Lemme 2 : Soit Ω un domaine invariant par dilatation. Alors (λ, u) est l'état fondamental associé à l'opérateur $P_{1,\Omega}$ si et seulement si $(B\lambda, v)$ est l'état fondamental pour $P_{B,\Omega}$ avec $v(x) = u(\sqrt{B}x)$ pour tout $x \in \Omega$.

Nous mettrons en évidence la propriété suivante lors de la modélisation numérique :

Lemme 3 :

- Notons Ω^t le domaine déduit de Ω par une translation de vecteur t . Alors les opérateurs $P_{B,\Omega}$ et P_{B,Ω^t} sont unitairement équivalents. De plus, u est un vecteur propre pour $P_{B,\Omega}$ associé à la valeur propre λ si et seulement si v , définie par $v(x) = e^{i\frac{B}{2}x \wedge t} u(x - t)$ pour tout $x \in \Omega^t$, est un vecteur propre pour P_{B,Ω^t} associé à la valeur propre λ .
- Notons Ω^θ le domaine déduit de Ω par une rotation d'angle θ . Alors les opérateurs $P_{B,\Omega}$ et P_{B,Ω^θ} sont unitairement équivalents. De plus, u est un vecteur propre pour $P_{B,\Omega}$ associé à la valeur propre λ si et seulement si v , définie en coordonnées polaires par $v(r, \phi) = u(r, \phi - \theta)$, est un vecteur propre pour P_{B,Ω^θ} associé à la valeur propre λ .

Nous allons commencer par donner quelques résultats sur les domaines infinis \mathbb{R}^2 , $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ et Ω_α . Une première question est de savoir si le bas du spectre est une valeur propre ou un élément du spectre essentiel selon l'angle du secteur. Donnons quelques précisions pour répondre en partie à cette question. Ces résultats sont démontrés dans [13], [5, 6].

Théorème 4 :

- $\mu(2\pi) = 1$ est une valeur propre.
- $\mu(\pi) = \Theta_0 \approx 0.59$ est un élément du spectre essentiel.
- Le bas du spectre essentiel associé à l'opérateur $-(\nabla - i\mathcal{A}_0)^2$ sur un secteur angulaire d'angle $\alpha \in]0, \pi[$ vaut Θ_0 (si $\mu(\alpha) < \Theta_0$, nous sommes donc assurés que $\mu(\alpha)$ est une valeur propre).
- $\alpha \mapsto \alpha\mu(\alpha)$ est croissante.
- $\alpha \mapsto \frac{\mu(\alpha)}{\alpha}$ est décroissante.
- Il existe une suite de nombres réelles $(m_j)_{j \in \mathbb{N}}$ avec $m_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ telle que :

$$\mu(\alpha) \sim \alpha \sum_{j \geq 0} m_j \alpha^{2j} \text{ quand } \alpha \rightarrow 0.$$

De plus, $\mu(\alpha) \leq \frac{\alpha}{\sqrt{3}}$.

- $\mu(\alpha)$ est une valeur propre pour $\alpha \in]0, \frac{\pi}{2}]$.

En utilisant des estimations d'Agmon [1], nous pouvons estimer la localisation des états propres dans le cas d'une valeur propre :

Théorème 5 : Soit α_1 tel que $\mu(\alpha) < \Theta_0$ pour tout $\alpha \in]0, \alpha_1]$. Désignons par u_α une fonction propre associée à $\mu(\alpha)$. Pour tout $\epsilon \in \left] 0, \Theta_0 - \sup_{\alpha \in]0, \alpha_1]} \mu(\alpha) \right[$, il existe une constante C_ϵ telle que pour tout $\alpha \in]0, \alpha_1]$:

$$\int_{\Omega_\alpha} e^{2\sqrt{\Theta_0 - \mu(\alpha) - \epsilon}|x|} |u_\alpha(x)|^2 dx \leq C_\epsilon.$$

2 Présentation de la méthode numérique

Nous avons voulu illustrer le comportement de l'état fondamental mais aussi regarder la dépendance du bas du spectre sur un domaine angulaire selon la valeur de cet angle et le comportement du bas du spectre selon l'intensité du champ magnétique. Hornberger et Smilansky [15] ont mis en place une méthode basée sur les intégrales de bord. Cette technique est valable uniquement pour les domaines réguliers. Nous avons choisi une méthode plus naturelle : la méthode des éléments finis.

Considérons \mathcal{T}_h une triangulation de Ω . Nous allons construire les matrices de masse M et d'assemblage A associées au maillage et à l'opérateur. Considérons deux éléments u, v de $H_B^1(\Omega)$. Notons U, V les vecteurs dont la i -ème coordonnée donne la valeur de u, v au i -ème point du maillage. Désignons par ϕ_i les fonctions de base pour l'élément fini \mathbb{P}_k considéré, les matrices M et A sont données par leurs coefficients $M_{i,j}$ et $A_{i,j}$ qui sont des approximations numériques des intégrales :

$$\begin{aligned} M_{i,j} &\approx \int_{\Omega} \phi_i \overline{\phi_j}. \\ A_{i,j} &\approx \int_{\Omega} (\nabla - iB\mathcal{A}_0)\phi_i \cdot \overline{(\nabla - iB\mathcal{A}_0)\phi_j}. \end{aligned}$$

Les matrices M et A vérifient donc :

$$\int_{\Omega} u \bar{v} \, dx \, dy \approx {}^t \bar{V} M U, \quad (3)$$

$$a_B(u, v) \approx {}^t \bar{V} A U. \quad (4)$$

À partir du calcul des deux matrices M et A , on souhaite déterminer la plus petite valeur propre de l'opérateur $P_{B,\Omega}$. Nous pouvons faire un parallèle entre le problème théorique initial et le problème numérique que nous allons résoudre :

- Trouver $u \in H_B^1(\Omega)$, $\mu \in \mathbb{R}$ tels que pour tout $v \in H_B^1(\Omega)$, $a_B(u, v) = \mu \langle u, v \rangle$,
- Trouver $U \in \mathbb{P}_k$, $\mu \in \mathbb{R}$ tels que pour tout $V \in \mathbb{P}_k$, ${}^t \bar{V} A U = \mu {}^t \bar{V} M A$.

Le problème approché est donc de déterminer les valeurs propres et vecteurs propres généralisés de la matrice A pour la matrice M , c'est-à-dire de trouver le plus petit $\lambda \in \mathbb{R}$ et $U \in \mathbb{P}_k$ tels que :

$$A U = \lambda M U.$$

Considérons l'exemple du triangle rectangle que l'on translate et que l'on maille de la même façon pour les trois domaines. Prenons une approximation \mathbb{P}_1 des fonctions, une formule d'intégration exacte à l'ordre 5 et un champ magnétique $B = 100$ Teslas. La Figure 1 représente le module du vecteur propre pour chacun des triangles. Les valeurs propres associées sont différentes, elles valent respectivement 54.9193, 66.7582 et 30.6244. Les résultats ne correspondent pas du tout aux résultats du Lemme 3. Par contre, prenons un champ magnétique moins élevé, $B = 10$

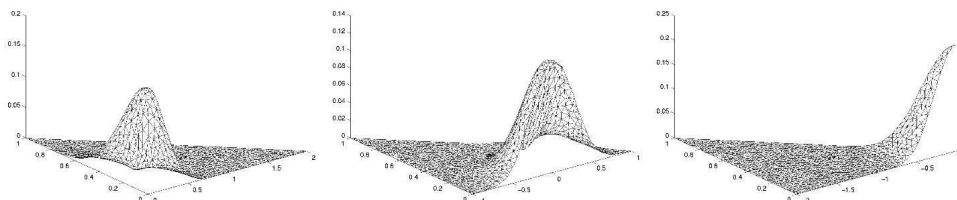


Figure 1: Recherche du premier vecteur propre associé à un triangle pour un champ magnétique $B=100$

Teslas et une approximation \mathbb{P}_2 , alors la valeur propre est identique dans les trois cas, elle vaut 2.0415 et le module du vecteur propre associé est superposable. Visualisons à la Figure 2 les résultats obtenus. Interprétons ces résultats. Nous avons vu au Lemme 3 l'effet d'une translation

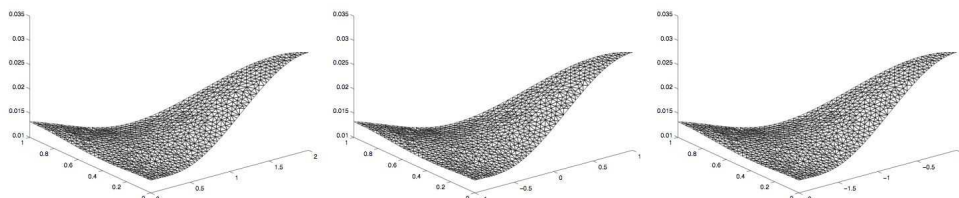


Figure 2: Recherche du premier vecteur propre associé à un triangle pour un champ magnétique $B=10$

du domaine. Une translation du domaine Ω d'un vecteur $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ajoute dans la phase du vecteur

propre un terme $\frac{B}{2}x_2$. Or si la triangulation n'est pas assez fine, nous ne captions pas toutes les oscillations de la phase. Ceci impose une première condition :

Condition sur la taille du maillage Soit h la taille du maillage, alors h doit être inversement proportionnel à l'intensité du champ magnétique B .

En outre, cette condition montre également que l'on ne pourra pas utiliser brusquement les techniques de raffinement de maillage. Nous allons donc chercher une formulation du problème qui conserve l'invariance du bas du spectre par translation du domaine.

3 Problème numérique équivalent

Nous allons regarder le problème vérifié par le module et la phase de l'état fondamental afin de mieux voir l'effet d'une translation du domaine sur la phase du vecteur propre.

Écrivons une fonction $u \in H_B^1(\Omega)$ sous la forme :

$$\forall x \in \Omega, u(x) = \rho(x)e^{i\theta(x)},$$

alors :

$$\int_{\Omega} |(\nabla - iB\mathcal{A}_0)u|^2 dx = \int_{\Omega} |(\nabla - i(B\mathcal{A}_0 - \nabla\theta))\rho|^2 dx.$$

Définissons l'opérateur :

$$P_{B,\Omega}^\theta = -(\nabla - i(B\mathcal{A}_0 - \nabla\theta))^2.$$

Par transformation de jauge, rappelé au Lemme 1, nous avons :

$$P_{B,\Omega}(\rho e^{i\theta}) = e^{i\theta} P_{B,\Omega}^\theta \rho.$$

Par conséquent, $u = \rho e^{i\theta}$ est un vecteur propre de phase θ pour l'opérateur $P_{B,\Omega}$ si et seulement si ρ est un vecteur propre réel pour l'opérateur $P_{B,\Omega}^\theta$. Déduisons-en alors un algorithme pour calculer l'état fondamental.

Algorithme

1. On calcule les matrices de masse M et d'assemblage A associées au maillage \mathcal{T}_h du domaine et à l'opérateur $P_{B,\Omega}$. On détermine la plus petite valeur propre généralisée et son vecteur propre associé. On en déduit le module du premier vecteur propre, noté ρ .
2. On détermine la phase θ du premier vecteur propre en résolvant un problème de minimisation de fonctionnelle J , ρ étant connu et J est définie par :

$$J(\theta) = \|\rho \nabla \theta\|_{L^2}^2 - 2B \int_{\Omega} \rho^2 \mathcal{A}_0 \cdot \nabla \theta.$$

3. On étudie ensuite le nouvel opérateur $P_{B,\Omega}^\theta$. On construit la matrice d'assemblage A_θ et calcule les éléments propres généralisés associés à la matrice A_θ et la matrice de masse M .
4. On réitère ainsi le procédé pour préciser le calcul de ρ et θ . Le procédé s'arrête quand la norme de la différence entre deux phases consécutives est assez petite.

Présentons les résultats de cet algorithme. Reprenons les mêmes maillages que précédemment. Appliquons un champ magnétique de 10 Teslas, et cherchons l'état fondamental en prenant une formule d'intégration d'ordre 5 et une approximation \mathbb{P}_2 . Les résultats sont présentés aux Figures 3 et 4. La figure de gauche donne le maillage, celle du centre, le module du premier vecteur propre et celle de droite l'argument. Nous cherchons l'argument avec une précision telle que la différence de norme L^2 entre deux arguments successifs soit inférieure à 10^{-6} et nous

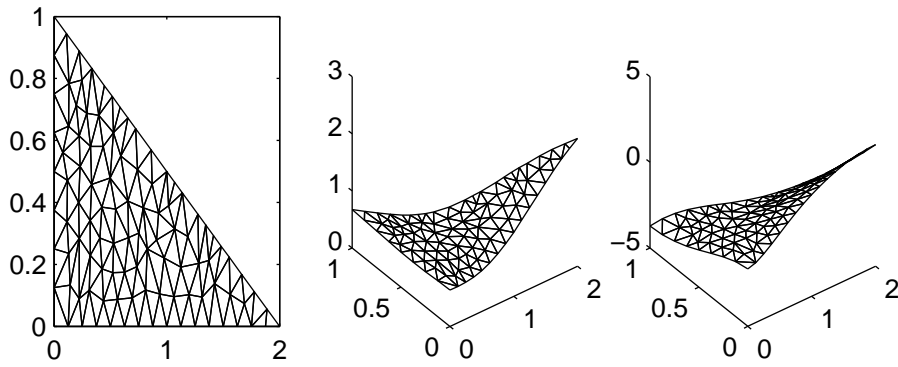


Figure 3: Module et argument du premier vecteur propre, B=10

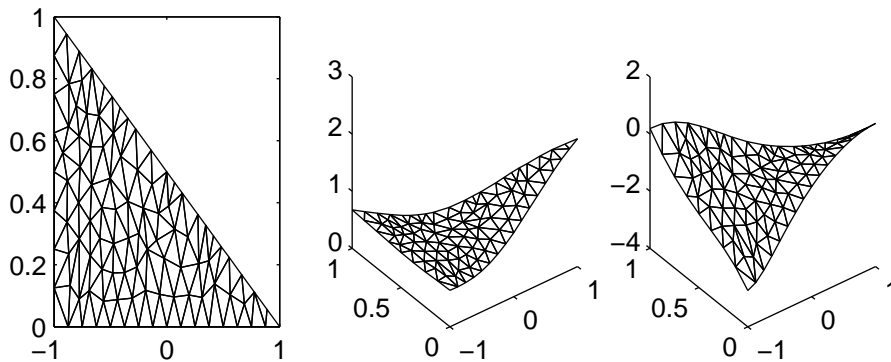


Figure 4: Module et argument du premier vecteur propre, B=10

limitons le nombre d'itérations à 200.. Dans les deux cas, nous trouvons la même valeur propre qui vaut 2.0793.

Nous pouvons visualiser l'effet de la translation au niveau de la phase. Pour cela, nous calculons la différence entre les phases calculées pour deux triangles translétés et affichons cette différence sur un maillage.

Commençons par estimer la différence entre la phase calculée pour les deux maillages translétés d'un vecteur $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Affichons la différence à la Figure 5. Notons θ_{12} cette différence. Sur

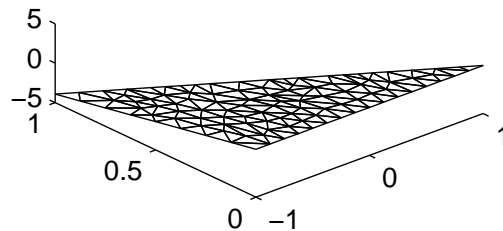


Figure 5: Différence de phases pour les solutions associées à deux maillages translétés , B=10

la Figure 5, on voit que la différence de phase est quasiment constante selon des abscisses et

linéaire selon les ordonnées. On estime ainsi :

$$\partial_{x_1}\theta_{12} = 0, \partial_{x_2}\theta_{12} = 5.$$

Or B vaut 10 Teslas et en reprenant le Lemme 3 précisant l'effet d'une translation, on voit exactement apparaître $\partial_{x_2}\theta - \frac{B}{2}x_1$. Or dans cet exemple, on fait une translation de 1cm selon les abscisses, qui se répercute donc sur la dérivée en x_2 de la phase.

Augmentons maintenant le champ magnétique dans le but de trouver une accumulation plus rapide de l'état fondamental dans le plus petit angle. Prenons un champ magnétique de 30 Teslas et gardons les mêmes approximations que précédemment. Présentons les résultats aux Figures 6 et 7. On trouve une valeur propre de 7.55. Par contre, on ne parvient pas à faire converger l'algorithme dans la mesure où la norme du reste reste de l'ordre du dixième. Visualisons au cas par cas ce que l'on obtient.

Commençons par considérer le premier triangle où l'angle droit est placé à l'origine. Les résultats sont présentés à la Figure 6. On arrête l'algorithme pour une norme de la différence entre deux phases consécutives de 0.35. Il se produit un saut de phase qui laisse penser à une ligne d'indétermination de l'argument.

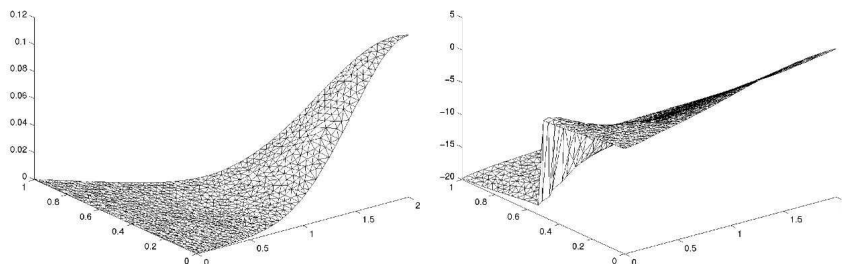


Figure 6: Module et argument du premier vecteur propre, B=30

Translatons ce triangle selon les abscisses de 1cm et essayons de déterminer la phase et l'argument de l'état fondamental. De la même façon, on ne peut pas demander que la différence entre deux phases consécutives soit très petite, on se limite à une norme de 0.57. On remarque à nouveau un important saut de phase au même niveau que précédemment comme le montre la Figure 7.

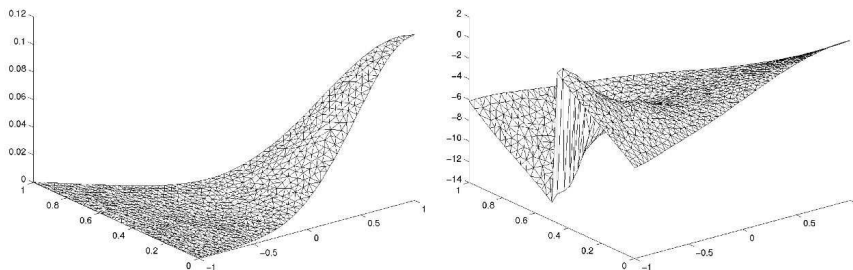


Figure 7: Module et argument du premier vecteur propre, B=30

Regardons la différence de phase obtenu pour les vecteurs propres associés à deux triangles translétés l'un par rapport à l'autre. On considère les phases données aux Figures 6 et 7. Leur

différence est représentée à la Figure 8. Effectuons le même calcul qu'auparavant. Notons δx_1 l'amplitude de la translation, alors :

$$\frac{B}{2}\delta x_1 = 15.$$

Calculons la pente selon les ordonnées de la différence de phase :

$$\partial_{x_2}\theta = 2 + 13 = 15.$$

On trouve bien les estimations attendues par le Lemme 3. Notons que si nous cherchons à aug-

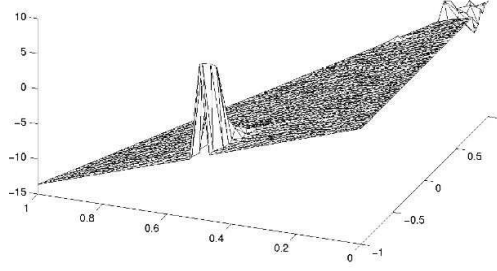


Figure 8: Différence de phases pour les solutions associées à deux maillages translattés , $B=30$

menter la précision, le problème devient très mal conditionné et l'algorithme ne converge plus. Proposons une critique de l'algorithme. Nous avons vu que lorsque l'intensité du champ magnétique augmentait, le module du vecteur propre devenait de plus en plus petit à l'intérieur du domaine. Pour déterminer la phase θ , nous résolvons un problème de minimisation de la fonctionnelle $J_1(\theta) = \int_{\Omega} \rho^2 (|\nabla\theta|^2 - 2B\mathcal{A}_0 \cdot \nabla\theta)$. Mais si le module ρ s'annule en un point x_0 , on ne parvient plus à déterminer la phase par minimisation. On ne pourra donc pas déterminer la phase θ en tout point.

Nous allons essayer de contourner ce problème en ne cherchant plus à déterminer la phase du vecteur propre mais en cherchant un champ de vecteurs V qui approche $\nabla\theta$.

Nous allons maintenant tester l'algorithme suivant.

Algorithme :

1. Calcul des matrices de masse et d'assemblage.
2. Détermination du module ρ du premier élément propre généralisé.
3. Détermination du gradient de la phase par l'une des relations :

$$\nabla\theta = \Re\left(-i\frac{\bar{u}}{|u|}\nabla\frac{u}{|u|}\right) \quad \text{ou} \quad \nabla\theta = \Re\left(-i\left(\frac{\bar{u}\nabla u}{|u|^2} - \frac{\nabla|u|}{|u|^2}\right)\right). \quad (5)$$

On peut regarder le comportement des champs de vecteurs.

4. Détermination de l'état fondamental u de $P_{B,\Omega}^\theta$.
5. Réitération.

Critère d'arrêt : la partie imaginaire du vecteur propre u est de norme infinie très petite.

L'intérêt de la deuxième expression de $\nabla\theta$ dans (5) est d'utiliser le gradient de u ou $|u|$ et non de $\frac{u}{|u|}$ et ainsi de garder une structure de polynômes.

Présentons les résultats pour un critère d'arrêt : $\|\Im(u)\|_{L^\infty} \leq 10^{-10}$.

Champ magnétique	10	20	30	40	50
Valeur propre attendue	2.0411	4.7938	7.2049	9.6092	12.0191
1e expr., exemple 1	2.0420	4.8564	7.8323	12.3962	19.2716
exemple 2	2.0457	4.8002	7.2644	9.9304	13.1517
2e expr., exemple 1	2.0419	4.8457	7.6823	11.2708	15.5078
exemple 2	2.0448	4.7841	7.2609	9.7663	12.5547
erreur	0.18	0.20%	0.78%	1.63%	4.46%

Ces résultats ne sont toujours pas satisfaisants dans la mesure où les solutions obtenues varient si l'on translate le domaine.

4 Nouvelle méthode

La plus grosse difficulté est de déterminer la phase une fois que l'on a déterminé le module qui est, comme on l'a vu, très petit à l'intérieur du domaine. Nous allons donc faire le cheminement inverse. Nous allons initialiser le calcul de la phase θ du problème de minimisation $J(\theta)$ à partir d'un module ρ aléatoire. Ceci va générer une première phase θ très régulière. Ensuite, nous allons déterminer le vecteur propre ρ associé à l'opérateur $P_{B,\Omega}^\theta$. A l'aide de ce nouveau ρ , nous allons résoudre le problème de minimisation de $J(\theta)$. Le gros avantage est que quand le module ρ est petit, il n'y a pas de problème de détermination de phase car elle a été déterminée lors de l'étape d'initialisation. En fait, la minimisation de la phase va essentiellement s'effectuer aux degrés de liberté où ρ n'est pas trop petit.

Algorithme :

1. Calcul de la matrice de masse M .
2. Choix aléatoire de ρ .
3. Détermination de θ qui minimise $\int_{\Omega} \rho^2 |BA_0 - \nabla\theta|^2$
4. Détermination de μ et ρ , état fondamental pour $P_{B,\Omega}^\theta$.
5. Répétition.

Reprenons les mêmes exemples que précédemment. Appliquons un champ magnétique de 10 Teslas et cherchons l'état fondamental associé avec des éléments finis \mathbb{P}_2 , une formule d'intégration d'ordre 5, une précision de 10^{-6} et le nombre d'itérations limité à 200. Les résultats sont représentés à la Figure 9. La première figure montre le maillage du domaine, la deuxième représente la phase, la troisième le module, la quatrième et la cinquième l'évolution de la valeur propre et du logarithme en base 10 de la valeur minimale du module en fonction du nombre d'itérations. Les résultats sur un domaine translaté sont donnés à la Figure 10. Remarquons que l'on obtient dans les deux cas la même valeur propre valant 2.06.

Reprenons le même algorithme mais un champ magnétique plus intense, $B = 30$. Les résultats sont présentés aux Figures 11 et 12. Dans le premier cas, la valeur propre vaut 7.309 et vaut 7.305 dans le second.

Remarquons que ce nouvel algorithme semble beaucoup plus robuste. Les problèmes de conditionnement n'apparaissent plus et l'on a ainsi trouvé une formulation invariante par translation. Il reste maintenant à estimer l'erreur commise entre la solution numérique et la solution exacte.

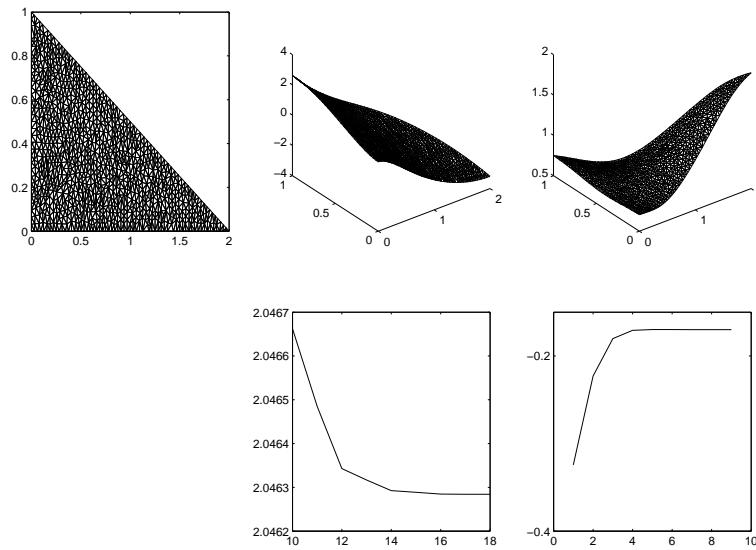


Figure 9: État fondamental, $B=10$

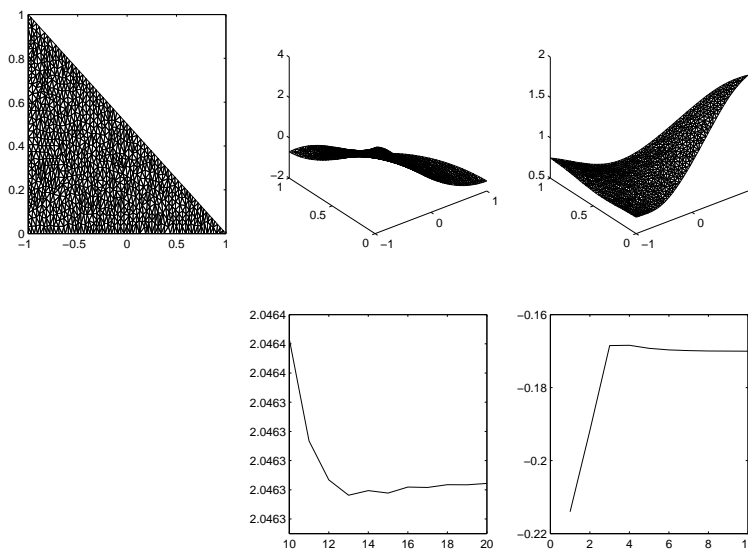


Figure 10: État fondamental, $B=10$

5 Estimateurs a posteriori

Il est important de pouvoir évaluer l'erreur que l'on commet lorsque l'on approche l'état fondamental. Pour estimer l'écart entre l'état fondamental exact et celui obtenu par la méthode numérique, nous allons utiliser un estimateur a posteriori. Mentionnons brièvement les résultats obtenus. Cette étude se base sur les travaux de Verfürth [24] et les résultats suivants sont démontrés dans [7].

Commençons par rappeler le principe et l'intérêt des estimateurs a posteriori.

Nous souhaitons déterminer un critère qui permet de savoir, uniquement à l'aide des calculs numériques de la solution et des données du problème, si la solution numérique approche la solution exacte avec une précision requise. Pour ce faire, nous allons construire un estimateur a posteriori qui estime localement, en chaque élément du maillage, l'erreur que l'on commet. Le

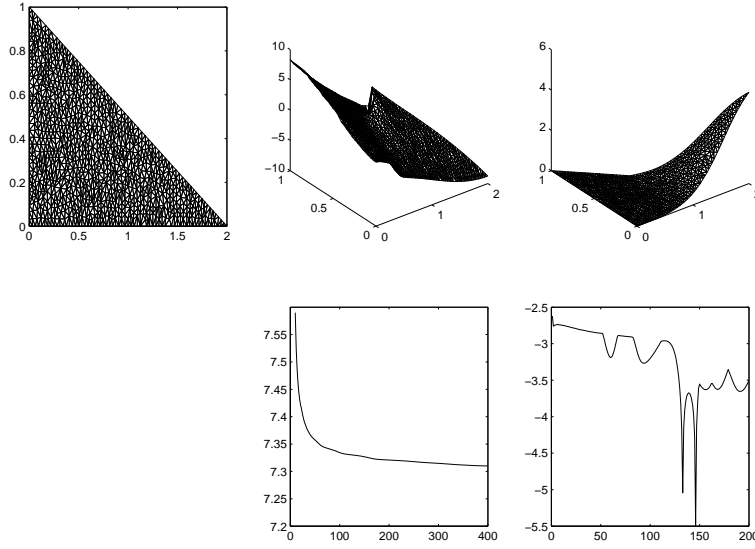


Figure 11: État fondamental, B=30

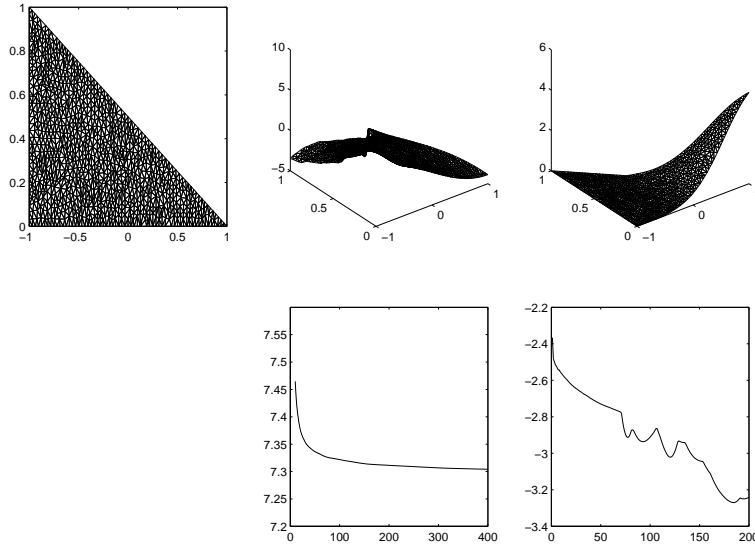


Figure 12: État fondamental, B=30

grand intérêt est donc de localiser avec précision l'endroit où le calcul n'est pas assez précis et donc de raffiner le maillage à ce niveau. Présentons maintenant ces estimateurs.

Soit \mathcal{T}_h une triangulation de Ω . Pour tout élément $T \in \mathcal{T}_h$, nous noterons $\mathcal{E}(T)$, l'ensemble des arêtes du triangle T , $\mathcal{E}_{h,\Omega}$, l'ensemble des arêtes internes, ω_T , l'ensemble des éléments ayant une arête commune avec T .

Nous faisons comme hypothèse que pour tout $T, T' \in \mathcal{T}_h$ sans sommet commun, et tout $E \in \mathcal{E}(T)$, $\frac{h_T}{h_E}$ et $\frac{h_{T'}}{h_E}$ sont bornés.

Soit (μ_h, u_h) une solution du problème approché. Définissons l'estimateur a posteriori η_T pour tout élément T de la triangulation \mathcal{T}_h :

$$\eta_T^2 := h_T^2 \int_T |-\nabla_{B\mathcal{A}_0}^2 u_h - \mu_h u_h|^2 + \sum_{E \in \mathcal{E}(T) \cap \mathcal{E}_{h,\Omega}} h_E \int_E |[n_E \cdot \nabla_{B\mathcal{A}_0} u_h]_E|^2.$$

- La première intégrale estime l'erreur commise sur la valeur propre.
- La deuxième mesure le défaut de la condition de Neumann au passage de chaque arête.

Théorème : Soit $[\mu, u]$ une solution exacte avec u normalisé. Soit $[\mu_h, u_h] \in \mathbb{P}_2$ une solution du problème approché avec u_h normalisé. Il existe alors des constantes c_1, c_2 qui ne dépendent que du quotient $\frac{h_T}{\rho_T}$ telles qu'on ait les estimations a posteriori suivantes :

$$|\mu - \mu_h| + \|u - u_h\|_{H_B^1(\Omega)} \leq c_1 \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_T^2 \right\}^{1/2}, \quad (6)$$

$$\left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_T^2 \right\}^{1/2} \leq c_2 \{ |\mu - \mu_h| + \|u - u_h\|_{H_B^1(\Omega)} \}. \quad (7)$$

Nous pouvons alors utiliser ces estimateurs pour mettre en place une technique de raffinement de maillage. Reprenons l'algorithme de la section précédente. À la fin de chaque itération, nous allons calculer les estimateurs d'erreurs η_T en chaque élément de la triangulation. Si l'estimateur est trop grand, nous allons raffiner le triangle T et recommencer le calcul sur le nouveau maillage raffiné, en prolongeant les fonctions de phase θ et de module ρ .

6 Conclusion

Nous avons ainsi mis en place une méthode numérique afin de calculer l'état fondamental de l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique constant. Il restait à mettre en place l'algorithme issu de cette méthode et d'utiliser des techniques de raffinement de maillage particulièrement adapté à ce problème où les fonctions propres sont très concentrées en certains points du bord du domaine et quasiment nul à l'intérieur du domaine. Cette méthode présente l'avantage de donner une estimation de l'erreur entre l'état fondamental numérique et exact. Nous pourrions également utiliser cette méthode afin de d'observer le comportement du bas du spectre sur un secteur angulaire par rapport à l'angle du secteur.

Références

- [1] S. AGMON *Lectures on exponential decay of solutions of second order elliptic equations.* Math. Notes 29, Princeton University Press, 1982.
- [2] P. BAUMAN, D. PHILLIPS AND Q. TANG *Stable nucleation for the Ginzburg-Landau system with an applied magnetic field.* Arch. Rational Mech. Anal. 142, p. 1-43, 1998.
- [3] A. BERNOFF AND P. STERNBERG *Onset of superconductivity in decreasing fields for general domains.* J. Math. Phys. 39-3, p 1272-1284, 1998.
- [4] P. BOLLEY AND J. CAMUS *Sur une classe d'opérateurs elliptiques et dégénérés à une variable.* J. Math. Pures et Appl. 51, p. 429-463, 1972.
- [5] V. BONNAILLIE *On the fundamental state for a Schrödinger operator with magnetic field in a domain with corners.* C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 336-2, p. 135-140, 2003.
- [6] V. BONNAILLIE *On the fundamental state for a Schrödinger operator with magnetic field in domains with corners.* Preprint of the Mittag-Leffler Institute, 2003.

- [7] V. BONNAILLIE *A posteriori error estimator for the eigenvalue problem associated to the Schrödinger operator with magnetic field.* submitted, 2003.
- [8] D. BRAESS *Finite elements.* Cambridge University Press, 2001.
- [9] F. BROSENS, J. T. DEVREESE, V. M. FOMIN AND V. V. MOSHCHALOV *Superconductivity in a wedge : analytical variational results.* Solid State Comm. 111-12, p 565-569, 1999.
- [10] P. CLÉMENT *Approximation by finite element functions using local regularization.* R. A. I. R.O., R-2, p. 77-84, 1975.
- [11] M. DAUGE AND B. HELFFER *Eigenvalues variation I, Neumann problem for Sturm-Liouville operators.* Journal of Differential Equations 104-2, p. 243-262, 1993.
- [12] V. M. FOMIN, J. T. DEVREESE AND V. V. MOSHCHALOV *Surface superconductivity in a wedge.* Europhys. Lett. 42-5, p. 553-558, 1998.
- [13] B. HELFFER AND A. MOHAMED *Semiclassical analysis for the ground state energy of a Schrödinger operator with magnetic wells.* J. of Functional Analysis 138-1, p 40-81, 1996.
- [14] B. HELFFER AND A. MORAME *Magnetic bottles in connection with superconductivity.* Journal of Functional Analysis 185, p. 604-680, 2001.
- [15] K. HORNBERGER AND U. SMILANSKY *The boundary integral method for magnetic billiards.* J. Phys. A : Math. Gen. 33, p. 2829-2855, 2000.
- [16] H-T. JADALLAH *The onset of superconductivity in a domain with a corner.* Ph. D. Indiana University (2001).
- [17] K. LU AND X-B. PAN *Estimates of the upper critical field for the Ginzburg-Landau equations of superconductivity.* Physica D 127, p. 73-104, 1999.
- [18] K. LU AND X-B. PAN *Gauge invariant eigenvalue problems on \mathbb{R}^2 and \mathbb{R}_+^2 .* Trans. A. M. S. 352, p. 1247-1276, 2000.
- [19] X. B. PAN *Upper critical field for superconductors with edges and corners.* Calc. Var. Partial Differential Equations 14, p. 447-482, 2002.
- [20] A. PERSSON *Bounds for the discrete part of the spectrum of a semi-bounded Schrödinger operator.* Math. Scand. 8, p. 143-153, 1960.
- [21] M. DEL PINO, P.L. FELMER AND P. STERNBERG *Boundary concentration for eigenvalue problems related to the onset of superconductivity.* Comm. Math. Physics 210, p. 413-446, 2000.
- [22] D. SAINT-JAMES AND P. G. DE GENNES *Onset of superconductivity in decreasing fields.* Phys. Let. 7-5, p. 306-308, 1963.
- [23] V. A. SCHWEIGERT AND F. M. PEETERS *Influence of the confinement geometry on surface superconductivity.* Phys. Rev. B 60-5, p. 3084-3087, 1999.
- [24] R. VERFÜRTH *A review of a posteriori error estimation and adaptative mesh refinement technique.* Wiley Teubner, 1996.