

Méthode des Volumes Finis

3.1. Introduction

Les modèles mathématiques des sciences et des techniques se présentent très souvent sous la forme de systèmes d'équations différentielles qui lient des fonctions inconnues à leurs dérivées partielles. Des conditions initiales et des conditions limites sont en général requises pour compléter le modèle. Par exemple, la loi physique de la conservation de l'énergie peut s'exprimer comme une équation différentielle de la température, fonction de la position et du temps. Pour tirer une information pertinente sur le processus physique modélisé, il est essentiel de trouver la fonction satisfaisant l'équation différentielle et les conditions aux limites. Il s'agit donc de résoudre un problème différentiel aux conditions aux limites.

Le chapitre précédent contient des équations de ce type de problème dont la solution peut parfois être obtenue analytiquement. Toutefois, dans la plupart des cas, cela n'est pas possible et l'unique possibilité est de calculer une fonction approchée au moyen de méthodes numériques. L'idée de base consiste à ne rechercher que la valeur des fonctions inconnues en un grand nombre de points : il s'agit de la *discrétisation*. Au lieu de résoudre un problème différentiel ou *problème continu*, on résout un grand système algébrique qu'on appelle le *problème discret*. Evidemment, les problèmes discrets dérivés de la modélisation physique se caractérisent par leur très grande taille et on n'a pu envisager leur résolution qu'avec les progrès récents de l'informatique.

Comment obtenir un problème discret ? C'est le rôle d'une méthode numérique telle que la méthode de différences finis MDF [38], la méthode d'éléments finis MEF [39], et les volumes finis MVF [40], qui sont à la base de nombreux logiciels utilisés pour la simulation.

Nous avons adopté la MVF, puisque qu'elle est facile à concevoir contrairement à la MEF et à implémenter surtout avec des géométries présentant la variation de quelques paramètres physiques à savoir le perméabilité et la masse effectives.

L'objet de ce chapitre est de présenter cette méthode des Volume finis de chacune des équations étudiées, et les méthodes de résolution et le processus de couplage entre ces équations.

3.2. Méthodes numériques de discrétisation

Les méthodes numériques de discrétisation citées précédemment consiste à ramener la résolution du système d'équations différentielles dans le domaine d'étude, avec des conditions aux limites appropriés, à celles d'un système d'équations algébriques dont la solution donne l'énergie potentielle et la densité des électrons.

3.2.1. Méthode des Différences Finis (MDF)

La méthode des différences finies, présente une technique de résolution des équations aux dérivées partielles, par l'approximation de dérivées par des différences finies. Cette méthode consiste à subdiviser le domaine d'étude en un nombre déterminé de nœuds et à représenter la fonction recherché en chacun des nœuds du domaine par un développement limité en série de Taylor. Ainsi, l'équation différentielle est transformée en équation algébrique pour chaque nœud. La résolution du système d'équations algébriques permet d'obtenir la distribution de la fonction étudiée dans le domaine d'étude.

La méthode de différence finie ne permet pas la prise en compte des conditions de passage d'un milieu physique à un autre et des non-linéarités, cela nécessite un traitement spécifique. D'autre part, elle s'adapte mal aux objets de la géométrie complexe à cause de la rigidité du maillage.

3.2.2. Méthode des Eléments Finis (MEF)

Cette méthode consiste à transformer les équations différentielles sous des formes intégrale basé sur le concept de minimization d'une quantité (comme l'énergie...), conduisant à la solution exacte. En d'autre terme elle s'agisse de trouver une fonction globale représentant le modèle mathématique dans le domaine étudié.

Le principe fondamental de la méthode des éléments finis consiste à [41,42] :

- Définir une partition du domaine d'étude c'est-à-dire subdiviser le domaine d'étude en régions élémentaires (Eléments Finis)

- Représenter la fonction inconnue sur chacun de ces éléments par une approximation polynomiale.
- Construire les formes intégrales.
- Minimiser l'intégrale.
- Une organisation matricielle des calculs.
- Une résolution du système algébrique.

La MEF est une méthode très puissante pour la résolution des équations aux dérivées partielles surtout dans les géométries complexes. Sa mise en œuvre par contre, est assez compliquée et nécessite une place mémoire assez importante.

3.2.3. Méthode des Volumes Finis (MVF)

La méthode des volumes finis est une version spéciale de la méthode des résidus pondérés où la fonction de projection égale à l'unité [40]. Cette méthode consiste à subdiviser le domaine d'étude en volumes élémentaires de telle manière que chaque volume entoure un nœud principal P. Chaque volume est délimité par : deux interfaces dans le cas monodimensionnel noté (e,w), quatre interfaces dans le cas bidimensionnel (e,w,s,n) et six interfaces dans le cas tridimensionnel (e,w,s,n,t,b). Chaque nœud principal P est limité par des nœuds voisins (E,W) dans le cas monodimensionnel, (E,W,S,N) dans le cas bidimensionnel, et (E,W,S,N,T,B) dans le cas tridimensionnel. L'équation différentielle est intégrée dans chaque volume élémentaire finis. Pour calculer l'intégrale dans ce volume élémentaire l'inconnue est représentée à l'aide d'une fonction d'approximation (linéaire, parabolique, exponentielle, de puissance etc.) entre deux nœuds consécutifs. Ensuite, la forme intégrale est discrétisée dans le domaine d'étude. Le résultat de discrétisation donne une équation algébrique qui est constituée par les valeurs nodales.

3.3. Méthode des Volumes Finis dans le cas monodimensionnel

3.3.1 Formulation monodimensionnelle de l'Equation de Poisson par la MVF

L'équation de poisson dans le cas monodimensionnel s'écrit

$$\frac{d}{dx} \left(\varepsilon \frac{d\phi}{dx} \right) + \rho = 0 \quad (3-1)$$

Le domaine d'étude est subdivisé en un nombre fini de nœuds. Chaque volume fini entoure un nœud principal "P". Les nœuds voisins sont "E" côté Est et "W" côté West. Les lignes en tirés représentent les faces du volume fini coté est (e) et coté west (w) (Figure 3-1).

Pour un problème monodimensionnels, le volume d'un volume fini est $\Delta x \times 1 \times 1$.

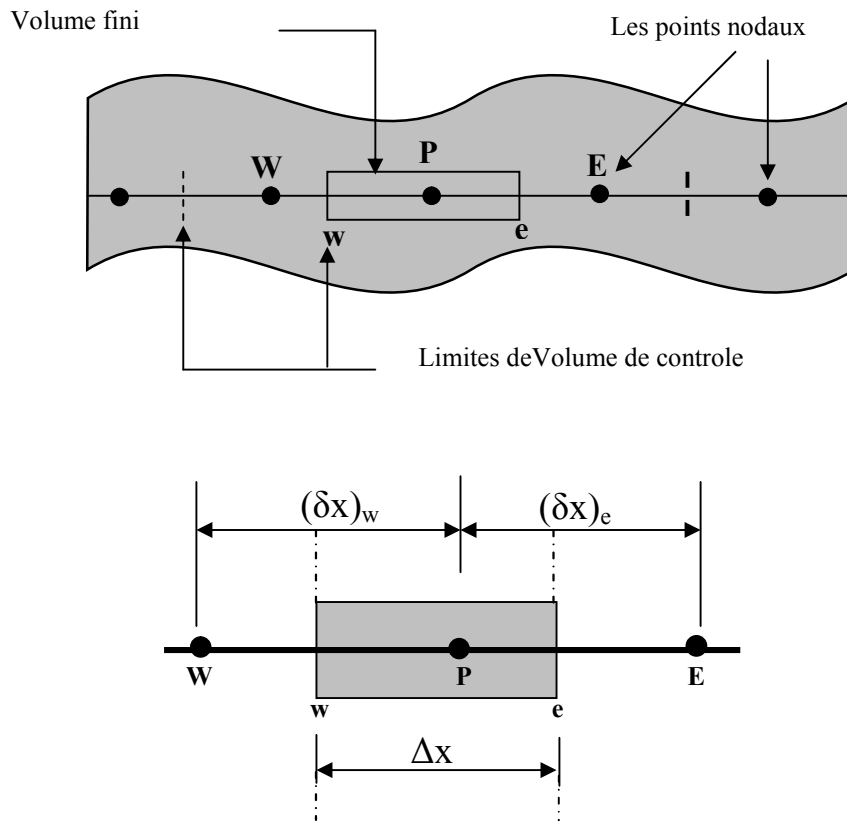


Figure 3-1 : Discretisation en volumes finis dans le cas monodimensionnel.

L'équation (3-1) est intégrée sur le volume finis limité par les faces (w,e)

$$\int_e^w \frac{d}{dx} \left(\varepsilon \frac{d\phi}{dx} \right) dx + \int_w^e \rho dx = 0 \tag{3-2}$$

après intégration on aura :

$$\left(\varepsilon \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\varepsilon \frac{d\phi}{dx} \right)_w + \int_w^e \rho dx = 0 \tag{3-3}$$

Un profil linéaire a été choisi afin d'exprimer la variation du potentiel ϕ entre les nœuds voisins :

$$\left[\varepsilon_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta x)_e} \right) - \varepsilon_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta x)_w} \right) \right] + \rho_p \Delta x \quad (3-4)$$

tels que :

- ϕ_P : Potentiel électrique au nœud P
- ϕ_E : Potentiel électrique au nœud E
- ϕ_W : Potentiel électrique au nœud W
- $(\delta x)_e$: Distance entre les nœuds P et E
- $(\delta x)_w$: Distance entre les nœuds W et P
- Δx : Longueur de volume fini

Ainsi l'équation algébrique finale s'écrit sous la forme :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + S \quad (3-5)$$

avec :

$$a_E = \frac{\varepsilon_e}{(\delta x)_e}$$

$$a_W = \frac{\varepsilon_w}{(\delta x)_w}$$

$$a_P = a_E + a_W$$

$$S = \rho_p \Delta x : \text{dit terme source.}$$

Dans le cas d'un maillage uniforme

$$\Delta x = (\delta x)_e = (\delta x)_w$$

alors on aura

$$a_E = \frac{\varepsilon_e}{\Delta x}$$

$$a_W = \frac{\varepsilon_w}{\Delta x}$$

$$a_P = a_E + a_W$$

Ainsi, on obtient une équation algébrique qui relie chaque nœud principal "P" avec les nœuds voisins "E" et "W". Si la discrétisation du domaine comporte N nœuds, on est amené à résoudre un système de N équations à N inconnues. Le système obtenu sera résolu par des méthodes numériques de résolutions.

3.3.2 Formulation monodimensionnelle de l'Equation de Schrödinger par la MVF

L'équation de Schrödinger dans le cas monodimensionnel s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^\alpha}{\partial x} \right) \right] + U \chi^\alpha = E^\alpha \chi^\alpha \quad (3-6)$$

Intégrons cette équation sur le volume fini limité par les interfaces (e,w)

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^\alpha}{\partial x} \right) dx \right] + \int_w^e U \chi^\alpha dx = \int_w^e E^\alpha \chi^\alpha dx \quad (3-7)$$

De la même manière que l'équation de Poisson, on choisit un profil linéaire. L'intégration de l'équation (3.7) donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_e^*} \left(\frac{\chi_E^\alpha - \chi_P^\alpha}{\Delta x} \right) - \frac{1}{m_w^*} \left(\frac{\chi_P^\alpha - \chi_X^\alpha}{\Delta x} \right) \right] + U_P \chi_P^\alpha \Delta x = E^\alpha \chi_P^\alpha \Delta x \quad (3-8)$$

Ainsi l'équation algébrique finale s'écrit sous la forme :

$$a_P \chi_P^\alpha = a_E \chi_E^\alpha + a_W \chi_W^\alpha \quad (3-9)$$

avec :

$$a_E = \frac{\hbar^2}{2m_e^* \Delta x}$$

$$a_W = \frac{\hbar^2}{2m_w^* \Delta x}$$

$$a_P = a_E + a_W + (U_P - E_\alpha) \Delta x$$

Le résultat obtenu représente une équation algébrique reliant l'inconnue au nœud principal "P" aux inconnus aux nœuds voisins "W", "E". Remarquer que cette équation algébrique ne contient pas le terme source S_p .

3.4 Méthode des Volumes Finis dans le cas bidimensionnel

3.4.1 Formulation Bidimensionnelle de l'Equation de Poisson par la MVF

La formulation monodimensionnelle ci-dessus de la méthode des volumes finis peut être étendue au cas bidimensionnel [40]. La formulation bidimensionnelle consiste à subdiviser le domaine d'étude (Ω) en un nombre d'éléments finis. Chaque élément contient quatre nœuds. Un volume fini entoure chaque nœud (Figure 3-2)

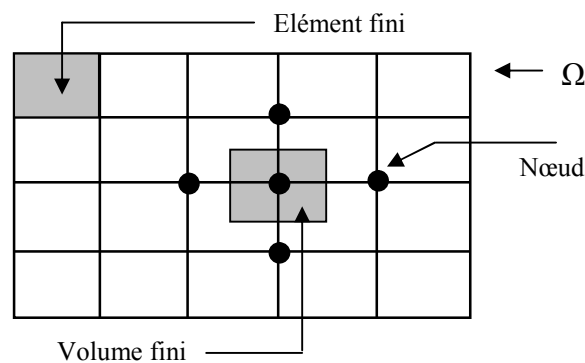


Figure 3-2 : Discrétisation en volumes finis du domaine d'étude dans le cas bidimensionnel.

Le nœud principal "P" est entouré par quatre nœuds voisins celui du Nord "N", celui du Sud "S" (dans la direction y) et celui de l'Ouest "W", celui de l'Est "E" (dans la direction x). les points (e : est, w : west, n : nord, s : sud).

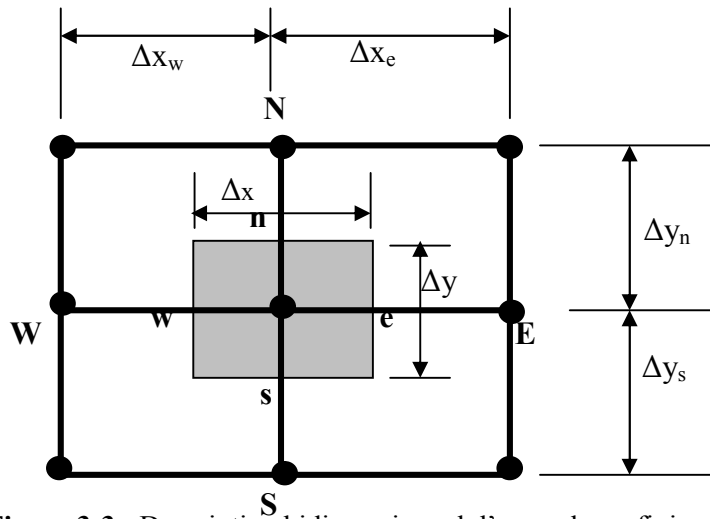


Figure 3-3 : Description bidimensionnel d'un volume fini.

L'équation de Poisson dans le cas bidimensionnel est [39] :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = -\rho \quad (3-10)$$

Cette équation est projetée sur une fonction de projection égale à l'unité. Elle est ensuite intégrée sur le volume fini correspondant au nœud **P**, on obtient :

$$\int_{w_s}^{e_n} \int_{w_s}^{e_n} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dy + \int_{w_s}^{e_n} \int_{w_s}^{e_n} \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx dy = \int_{w_s}^{e_n} \int_{w_s}^{e_n} -\rho dx dy \quad (3-11)$$

L'intégration de la partie gauche de l'égalité (3-11) sur le volume fini limité par (e, w, s, n) est :

$$\int_{w_s}^{e_n} \int_{w_s}^{e_n} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dy + \int_{w_s}^{e_n} \int_{w_s}^{e_n} \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx dy = \left[\left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y + \left[\left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x \quad (3-12)$$

Un profil linéaire a été choisi pour exprimer la variation de potentiel ϕ entre les nœuds voisins. Le résultat obtenu est constitué uniquement par les valeurs nodales.

$$\begin{aligned} \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e &= \varepsilon_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_e}\right) \\ \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_w &= \varepsilon_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x_w}\right) \\ \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_n &= \varepsilon_n \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y_n}\right) \\ \left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_s &= \varepsilon_s \left(\frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta y_s}\right) \end{aligned}$$

L'intégral de la partie droite de l'égalité (3-11) donne :

$$\int_w^e \int_s^n \rho dx dy = \rho_p \Delta x \Delta y \quad (3-13)$$

Ainsi l'équation algébrique finale s'écrit sous la forme :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S \quad (3-14)$$

avec :

$$\begin{aligned} a_E &= \varepsilon_e \frac{\Delta y}{\Delta x_e} \\ a_W &= \varepsilon_w \frac{\Delta y}{\Delta x_w} \\ a_N &= \varepsilon_n \frac{\Delta x}{\Delta y_n} \\ a_S &= \varepsilon_s \frac{\Delta x}{\Delta y_s} \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S \\ S &= \rho_p \Delta x \Delta y \end{aligned}$$

Le résultat obtenu représente une équation algébrique reliant l'inconnue au nœud principal "P" aux inconnues aux nœuds voisins "W", "E", "S" et "N".

3.4.2 Formulation Bidimensionnelle de l'Equation de Schrödinger par la MVF

L'équation de Schrödinger dans le cas bidimensionnel est:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^\alpha}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^\alpha}{\partial y} \right) \right] + U \chi^\alpha = E^\alpha \chi^\alpha \quad (3-15)$$

Intégrons cette équation sur le volume fini limité par les interfaces (e,w,s,n)

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\int \int_{w,s}^e \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^\alpha}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^\alpha}{\partial y} \right) \right) dx dy \right] + \int \int_{w,s}^e U \chi^\alpha dx dy = \int \int_{w,s}^e E^\alpha \chi^\alpha dx dy \quad (3-16)$$

De la même manière que l'équation de Poisson, on choisit un profil linéaire. L'intégration de la partie gauche de l'équation (3-16) donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_e^*} \left(\frac{\chi_E^\alpha - \chi_P^\alpha}{\Delta x_e} \right) \Delta y - \frac{1}{m_w^*} \left(\frac{\chi_P^\alpha - \chi_X^\alpha}{\Delta x_w} \right) \Delta y + \frac{1}{m_n^*} \left(\frac{\chi_N^\alpha - \chi_P^\alpha}{\Delta y_n} \right) \Delta x - \frac{1}{m_s^*} \left(\frac{\chi_P^\alpha - \chi_S^\alpha}{\Delta y_s} \right) \Delta x \right] + U_P \chi_P^\alpha \Delta x \Delta y \quad (3-17)$$

L'intégration de la partie droite de l'égalité (3-16) donne

$$\int \int_{w,s}^e E \chi_P^k dx dy = E^k \chi_P^k \Delta x \Delta y \quad (3-18)$$

Ainsi l'équation algébrique finale s'écrit sous la forme :

$$a_P \chi_P^k = a_E \chi_E^k + a_W \chi_W^k + a_S \chi_S^k + a_N \chi_N^k \quad (3-19)$$

avec :

$$a_E = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\Delta y}{\Delta x_e}$$

$$a_N = \frac{\hbar^2}{2m_n^*} \frac{\Delta x}{\Delta y_n}$$

$$a_W = \frac{\hbar^2}{2m_w^*} \frac{\Delta y}{\Delta x_w}$$

$$a_S = \frac{\hbar^2}{2m_s^*} \frac{\Delta x}{\Delta y_s}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + (U_P - E_k) \Delta x \Delta y \quad (3-20)$$

3.5. Méthodes de Résolution et Algorithme de Couplage

3.5.1. Méthodes de Résolution de l'Equation de Poisson

L'équation algébrique résultant de la discrétisation de l'équation de Poisson par la MVF présente un système linéaire sous forme matricielle $[A][X]=[B]$ ou $[A][\Phi]=[S]$ qui est résolue par des méthodes directes ou itératives [42], à savoir la méthode d'élimination de Gauss et la méthode Gauss-Seidel respectivement. Les conditions de type Dirichlet non homogène sont imposées sur les contacts et les conditions de type Neumann sont imposées sur les autres limites

3.5.1.1. Méthodes directes

Ces méthodes conduisent à une solution en un nombre fini d'étapes (éventuellement grand), cependant, comme l'ordinateur représente chaque nombre par un ensemble limité de digits, les méthodes directes sont précises mais demandent beaucoup d'espace mémoire et de temps de calcul.

3.5.1.2 Méthodes itératives

Pour les matrices d'ordre élevé, comportant de nombreux éléments nuls (matrice creuse), on utilise les méthodes itératives qui font passer l'inconnue estimée $X^{(K)}$ à une autre estimée $X^{(K+1)}$, s'il y a convergence, la solution ne pouvait être atteinte qu'après un nombre d'itérations. Parmi ces méthodes, nous citons :

* Méthode de Jacobi

Elle est basée sur la transformation du système $[A][X]=[B]$ en

$$X_i^{(K+1)} = \left[b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} X_j^K \right] / a_{ij} \quad ; \quad (i \neq j), i = 1, \dots, n \quad (3-21)$$

On estime une valeur arbitraire initial X_i^0 pour $(K=0)$, le calcul sera arrêté si

$|X_i^{(K+1)} - X_i^K| < \varepsilon$, dans le cas d'une précision absolue et $\frac{|X_i^{(K+1)} - X_i^K|}{X_i^K} < \varepsilon$, dans le cas d'une

précision relative.

ε : Précision imposée par l'utilisateur.

* Méthode de Gauss Seidel

Cette méthode consiste à transformer le système $[A][X]=[B]$ en :

$$X_i^{(k+1)} = \frac{\left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} X_j^{(k+1)} - \sum_{j=(i+1)}^n a_{ij} X_j^k \right]}{a_{ii}} \quad i=1, \dots, n \quad (3-22)$$

En donnent aux inconnues X_i^k des valeurs arbitraires initiales X_i^0 (pour $k=0$)

Le processus sera arrêté si :

$|X_i^{(k+1)} - X_i^k| < \varepsilon$, dans le cas d'une précision absolue et $\frac{|X_i^{(k+1)} - X_i^k|}{X_i^k} < \varepsilon$, dans le cas d'une précision relative.

ε : Précision imposée par l'utilisateur.

* Méthode de relaxation

Pour améliorer la rapidité de la convergence, si on s'aperçoit qu'il n'y a pas divergence, dans le cas des méthodes itératives, on utilise un facteur de relaxation α tel que :

$$X_i^{(k+1)} = \alpha X_i^k + (1 - \alpha)(X_i^{(k+1)} - X_i^k) \quad (3-23)$$

Les méthodes itératives sont généralement préférées par rapport aux méthodes dites directes, pour les grands systèmes $[A][X] = [B]$ à matrice creuse parce qu'elles ne modifient pas la matrice de rigidité $[A]$ et que dans un grand nombre d'applications, cette matrice $[A]$ est creuse et présente une structure particulière (triangulaire) ce qui lui permet de ne pas être mémorisée explicitement et assure pratiquement la convergence.

La méthode de Gauss-Seidel est préférée à celle de Jacobi, parce qu'elle consomme moins de mémoire et converge souvent plus vite.

La méthode de relaxation est généralement beaucoup plus rapide que celle de Gauss-Seidel, même si le facteur optimal est expérimentalement selon l'aspect physique du problème à traiter. D'autres méthodes, tel que la méthode des gradients conjugués sont aussi utilisées.

Vu la particularité de l'équation de Poisson dans le cas monodimensionnel du fait qu'elle se transforme en un système matriciel tri-diagonal, ce système peut être résolu via un algorithme simplifié de la méthode directe de Gauss. Ceci est quelque fois appelé algorithme de THOMAS ou T.D.M.A. (Tri Diagonal Matrix Algorithm). La désignation T.D.M.A se

rapporte au fait que la matrice des coefficients qui sont décrits tous en trois termes alignés en diagonal. Cet algorithme est basé sur un changement de variable simple comme suit :

De la figure (3-1), on numérote de $1, 2, \dots, N$, les nœuds du maillage.

Les équations algébriques peuvent être mis sous la forme :

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + C_i \phi_{i-1} + d_i \quad (3-24)$$

Pour $i = 1, 2, \dots, N$; ainsi le potentiel électrique ϕ est rapporté au voisinage des potentiels électriques ϕ_{i-1} et ϕ_{i+1} tenons compte de la forme spéciale des équations aux noeuds limites.

$$\text{Nous posons } C_1 = 0, \quad B_N = 0.$$

Ainsi les potentiels ϕ_{i-1} et ϕ_{i+1} n'auront aucun rôle significatif à jouer (quand les potentiels aux nœuds limites sont données, les équations prennent une forme triviale par exemple.

Si ϕ_i est données, nous avons $a_i = 1, b_i = 0, c_i = 0$ et d_i la valeur de ϕ_i ces conditions impliquent que ϕ_i est connue en termes de ϕ_2 .

L'équation pour $i = 2$ est en relation avec ϕ_2 et ϕ_3 , mais puisque ϕ_1 peut être exprimer en termes ϕ_2 , cette relation se réduit à la relation entre ϕ_2 et ϕ_3 , en d'autre terme ϕ_2 peut être exprimé en terme de ϕ_3 .

Ce processus de substitution peut continuer jusqu'à ce que ϕ_n est formellement exprimée en terme de ϕ_{n+1} , mais puisque ϕ_{n+1} n'existe réellement, nous obtenons la valeur numérique de ϕ_n à cette étape, cela nous permet d'obtenir ϕ_{n+1} à partir de ϕ_n , ϕ_{n-2} à partir de $\phi_{n-1}, \dots, \phi_2$ à partir de ϕ_1 , ϕ_1 et à partir de ϕ_0 . Ceci est l'essence de la TDMA.

Supposons que dans le processus de substitution, on cherche à obtenir la relation suivante :

$$\phi_i = P_i \phi_{i+1} + Q_i \quad (3-25)$$

$$\text{où } \phi_{i-1} = P_{i-1} \phi_i + Q_{i-1} \quad (3-26)$$

Substituant l'équation (3-11) dans l'équation (3-9) nous aurons :

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + C_i (P_{i-1} \phi_i + Q_{i-1}) + d_i \quad (3-27)$$

Les coefficients P_i et Q_i sont calculés par les expressions :

$$\begin{cases} P_i = \frac{b_i}{a_i - C_i P_{i-1}} \\ Q_i = \frac{d_i + C_i Q_{i-1}}{a_i - c_i P_{i-1}} \end{cases} \quad (3-28)$$

il y a une relation de récurrence, puisque P_i et Q_i sont données en termes de P_{i-1} et Q_{i-1} .

Pour $i=1$; on a

$$\begin{cases} p_1 = \frac{b_1}{a_1} \\ Q_1 = \frac{d_1}{a_1} \end{cases} \quad (3-29)$$

Au nœud limite final, nous aurons $B_N = 0$, cela conduit à $P_N = 0$ et à partir de l'équation (3-10), nous obtenons $\phi_n = Q_n$.

*Résumé de l'algorithme

- 1- Calcul de P_1 et de Q_1 à partir de l'équation (3-29)
- 2- Utiliser les relations récursives (3-28) pour obtenir P_i et Q_i pour $i=2,3,\dots,N$.
- 3- Poser $\phi(N) = Q(N)$.
- 4- Utilisons l'équation (3-25), pour $i=N-1, N-2,\dots,3, 2,1$, pour obtenir $\phi_{N-1}, \phi_{N-2}, \dots, \phi_3, \phi_2, \phi_1$.

3.5.2 Méthodes de Résolution de l'Equation de Schrödinger

L'équation algébrique résultant de la discrétisation de l'équation de Schrödinger par la MVF ne contient pas le terme source ce qui donne une solution triviale. Ce type de problème est dit problème à valeurs et vecteurs propres. Les conditions aux limites du type Neumann sont choisies pour l'équation de Schrödinger. Bien que seulement les états liés sont considérés, donc les inconnues et ces dérivés qui sont ici les fonctions d'onde doivent être nulles aux limites du domaine.

La MVF appliquée à l'équation Schrödinger nous conduit à un système de valeur propre, $Hx = \lambda x$, où H est une matrice généralement non symétrique. Dans un tel type de problème nous nous intéressons à la détermination des vecteurs et des valeurs propres c'est à dire les fonctions d'onde et les énergies propres correspondantes par des algorithmes spéciales pour ce type de problème. Compte tenu de la taille importante des vecteurs recherchés et du fait que

seules quelques valeurs propres sont requises (une dizaine tout au plus), nous nous sommes tournés vers un algorithme du type Arnoldi. Pour De plus amples détails sur cet algorithme voir [43].

3.5.3. Algorithme de Couplage

Deux modèles de couplage existent pour la résolution des équations algébriques résultantes de la discrétisation des équations de semiconducteurs : le modèle de couplage direct MCD (couplage fort) et le modèle de couplage alterné MCA (couplage faible).

Dans notre cas le premier modèle n'est pas utilisé à cause de la différence qui existe entre les deux types des systèmes d'équations algébriques puisque l'équation de Schrödinger est de type des problèmes de valeurs et de vecteurs propres.

Pour cela on utilise le modèle de couplage alterné MCA. Dans ce modèle les équations sont résolues d'une manière auto-coherente c'est à dire séparément et le couplage se fait par la substitution des données d'un problème à l'autre. Les termes de couplage sont : l'énergie potentielle et la densité des charges.

La solution auto-coherente commence par initialisation de n et p et V qui peuvent être obtenus par résolution semiclassique de l'équation de Poisson dans lequel les densités des charges sont données par [eq (2-14)]:

$$n = 2 \left(\frac{2\pi m_c^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_F - E_c}{k_B} \right) \quad (3-30)$$

$$p = 2 \left(\frac{2\pi m_v^* k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_v - E_F}{k_B} \right) \quad (3-31)$$

ou $F_{1/2}$ est l'intégrale de Fermi d'ordre 1/2.

Généralement dans notre cas, le système étudié présente un fort confinement pour les électrons, puisque la plupart des différences des gaps apparaissent dans la bande de conduction et que la structure est dopée avec des dopants de type n , ce qui implique une faible densité de charge positive libre dans la bande de valence. C'est pour cette raison, soit on néglige ce qui se passe dans la bande de valence ou d'approximer la densité de trous par l'équation (3-31). Finalement l'organigramme de cet algorithme de couplage est présenté en figure 3.4.

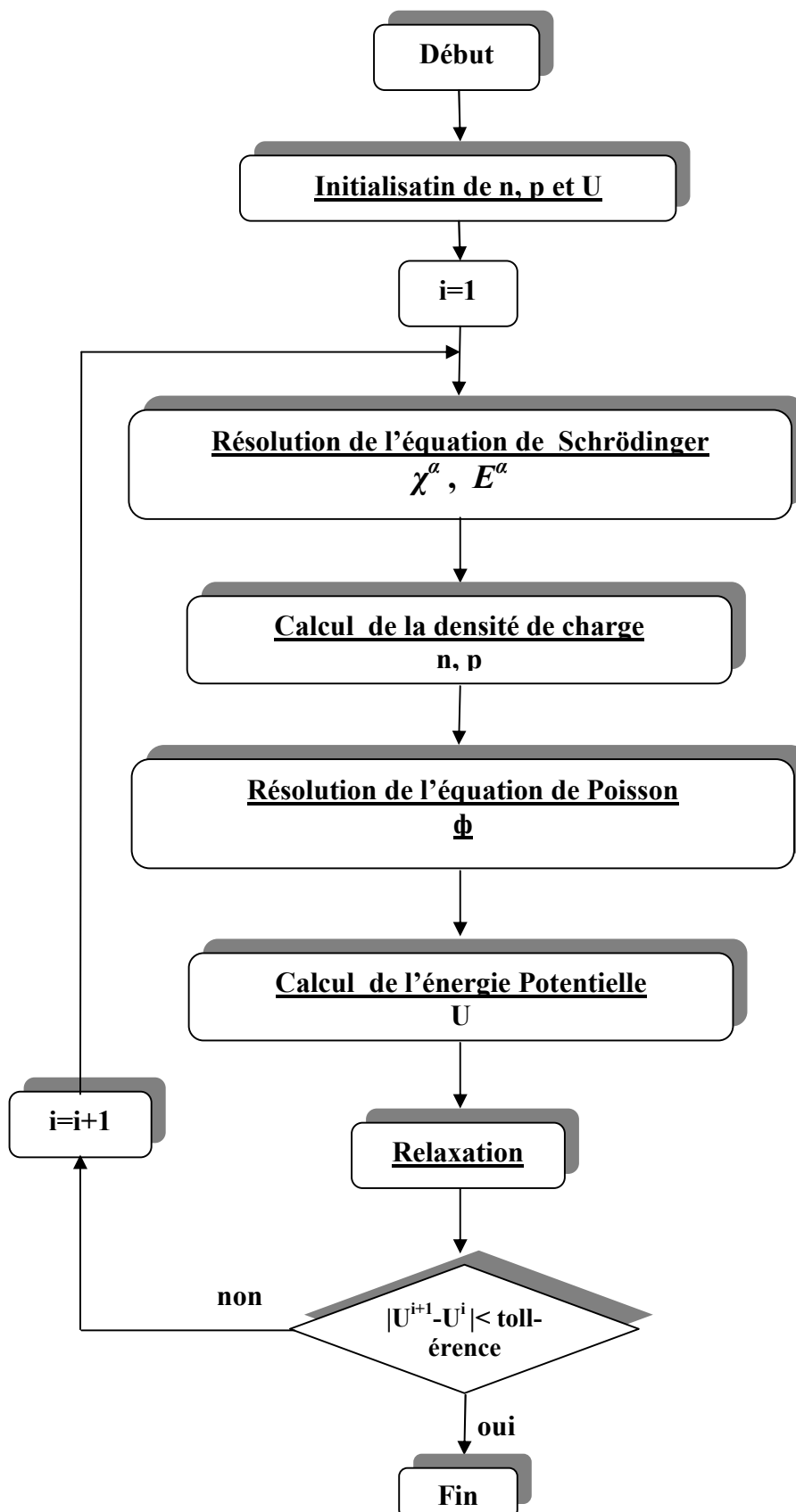


Figure 3.4: Algorithme de la résolution auto-cohérente des équations de Schrödinger et de Poisson

