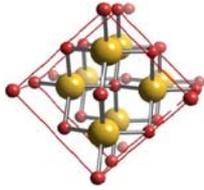


REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE ABOU-BAKR BELKAÏD DE TLEMCCEN
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de
Magistère en Physique
Option : Matière Condensée & Semi-conducteur

Par

Mr. BAILEK Nadjem

THEME

*Résolution de l'équation de Schrödinger sur une
base d'ondelettes – Cas des systèmes
unidimensionnels*

Présenté le Juin 2012 devant le jury

Pr. A. Houari	Président	Université de Tlemcen - Algérie
Pr. T. Bouchaour	Examineur	Université de Tlemcen - Algérie
Dr. A. Benosmane	Examineur	Université de Tlemcen - Algérie
Pr. G. Merad	Encadreur	Université de Tlemcen – Algérie

Dédicace

Je dédie ce mémoire à tous ceux que j'aime.

Mes premières pensées vont tout particulièrement à mes

Parents, à qui je dois ce succès et pour qui le sens du sacrifice, au cours de ces longues années d'étude, ne s'est jamais tari et a été le plus précieux de leurs cadeaux.

Grâce à leur soutien et à leurs encouragements subtilement dosés, ils m'ont permis de vivre mes années de scolarité avec sérénité et efficacité.avec sérénité et efficacité.

REMERCIEMENTS

Le travail que j'ai l'honneur de vous présenter, a été réalisé dans le laboratoire de recherche d'Etudes et Prédiction des Matériaux (LEPM) affilié à l'Unité de Recherche des Matériaux et des Energies Renouvelables (URMER) de l'Université de Tlemcen, sous la direction de Monsieur Ghouti MERAD, Professeur à l'université de Tlemcen. Je tiens à lui exprimer mes plus vifs remerciements pour sa disponibilité malgré un emploi du temps parfois surchargé, mais aussi pour son expérience et ses conseils scientifiques qu'il m'a prodigué tout au long de ce travail.

Je remercie vivement Monsieur Sari Abdelhamid, docteur à l'université de Tlemcen pour m'avoir dirigé au cours de ce travail et pour m'avoir fait bénéficier de ces compétences scientifiques, ses qualités humaines et sa constante disponibilité.

J'exprime mes sincères remerciements à Monsieur A.HOUARI, Professeur à l'Université de Tlemcen, d'avoir accepté de présider le jury de ce mémoire.

Je remercie sincèrement Monsieur T. Bouchaour, professeur à l'Université de Tlemcen, et Monsieur A. Benosmane, Maître de Conférences à l'Université de Tlemcen d'avoir accepté de faire partie de ce jury.



TABLE DES MATIÈRES



Introduction Générale.....	5
Références.....	7

Chapitre 1 : Présentation de la théorie des ondelettes

1.1. La transformée de Fourier	9
1.1.1. Analyse de Fourier	9
1.1.2. Transformée de Fourier	10
1.1.3. Transformée de Fourier rapide	11
1.1.4. La transformée de Gabor	14
1.2. La transformée en ondelette	16
1.2.1. Historique	16
1.2.2. Ondelette et la transformée en ondelette.....	16
1.2.3. La transformée en ondelettes continues	18
1.2.4. La transformée en ondelettes discrètes	20
1.2.5. Av*antage de la transformée en ondelettes	21
Références.....	22

Chapitre 2 :Analyse multi-échelle

2.1. Analyse multi-échelle.....	26
2.1.1. Définition générale.....	26
2.1.2. Cas dyadique.....	27
2.2. Orthogonalité, bi-orthogonalité	30
2.3. Transformée orthogonales de Daubechies.....	33



TABLE DES MATIÈRES



2.3.1. Évaluation de la nième dérivée de $\phi(\mathbf{x})$	34
2.3.2. Évaluation de moments $M_k^m(\mathbf{x})$	35
2.3.3. 2-termes de Coefficients de Connexion des ondelettes	36
2.3.4. 3-termes de Coefficients de Connexion des ondelettes	37
Références.....	39

Chapitre 3 : Méthodes de Galerkin pour la résolution de l'équation de Schrödinger

2.2. Introduction	43
2.3. Présentation de l'équation de Schrödinger.....	44
2.2. Méthode de Galerkin pour résolution de l'équation de Schrödinger.....	47
Référence	56

Chapitre 4 : Résultats des Applications

4.1. Résultats numériques.....	59
4.1.1. Coefficients de connexions	59
4.1.2. Coefficients de 2-termes	60
4.2. Marches de potentiel	63
4.3. Modèle de Kronig-Penney	67
Références.....	70
Conclusion générale	72
Annexe	74



INTRODUCTION GENERALE



INTRODUCTION GENERALE :

En mécanique quantique, les phénomènes sont décrits par la fonction d'onde qui contient toutes les informations sur les particules d'un système et son comportement suit l'équation de Schrödinger[1].

La résolution numérique de l'équation de Schrödinger reste un problème très important intervenant dans de nombreux calculs de physique. Cette équation trouve plusieurs méthodes de résolution comme la méthode de la DTF (density functional theory)[2-4], Hartree-Fock[5], QMC (quantum Monte Carlo)[6], DVR (discrete variable representation)[7], méthode tight-binding[8-9], la théorie des perturbations[10], la méthode variationnelle de Ritz[11], etc. Généralement ces méthodes sont limitées.

Dans ce travail nous exposons la théorie des ondelettes et développons les solutions de l'équation de Schrödinger sur une base d'ondelette dans le cas des systèmes unidimensionnels.

Ce travail se partage sur quatre chapitres :

* Dans le premier chapitre :

Nous présentons ce qu'est une théorie des ondelettes tout en introduisant l'analyse de Fourier et sa transformée puis comment cette dernière a donné



INTRODUCTION GENERALE



naissance à la transformée de Gabor. Pour les besoins de traitement numérique nous présentons la transformée de Fourier rapide.

Enfin nous définissons ce que représente une ondelette ainsi que sa transformée, dans le cas continu et dans le cas discret (cas dyadique).

* Dans le deuxième chapitre :

Nous exposons l'analyse multi-résolution ainsi que ses propriétés. Nous introduisons les bases orthogonales et finalement nous donnons quelques éléments sur le calcul des coefficients de connexion d'ondelettes.

* Dans le troisième chapitre :

Nous introduisons la forme d'une équation de Schrödinger, sous la méthode d'ondelettes-Galerkin. Et exposons comment peut-on l'appliquer sur notre équation afin de déterminer l'énergie et la fonction d'onde du système.

* Enfin dans le quatrième chapitre :

En utilisant un programme numérique écrit dans le langage Matlab, nous présentons les résultats relatifs aux coefficients d'ondelettes, dans le cas du potentiel périodique (Kronig-Penney) et les comparons avec ceux obtenus par des méthodes de résolutions classiques.

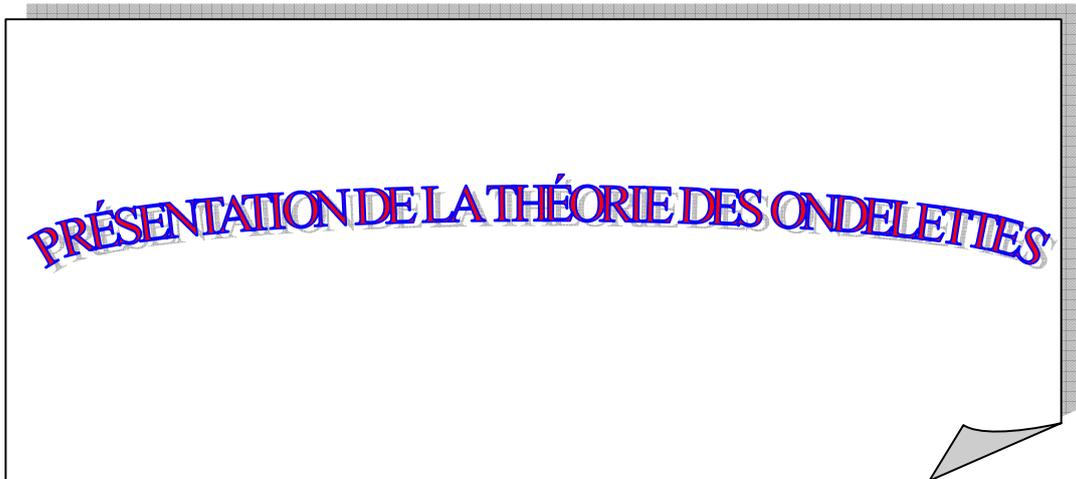
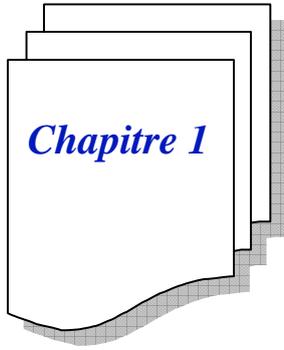


INTRODUCTION GENERALE



Références

- [1] C .Chauvin, J. Math : Les ondelettes comme fonctions de base dans le calcul de structures électroniques, I. N. Pol. de Grenobl,2005.
- [2] H. Löwen, J. Phys.: Condens. Matter 15, V1 ,2003.
- [3] M. Schmidt, J. Phys: Condens. Matter 15, S101,2003.
- [4] R. J. Furnstahl, J. Phys. G 31, S1357 ,2005.
- [5] M. Bender, P. H. Heenen, and P. G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. 75, 121,2003.
- [6] J.V. Lill, G.A. Parker, and J.C. Light, Chem. Phys. Lett. 89, 483 (1982); J. Chem. Phys.85, 900 (1986).
- [7] S. L. Altmann, C. J. Bradley, Proc. Phys. Soc. London 86, 915 ,1965.
- [8] T. K. Mitra, J. Phys. C 11, L191 ,1978.
- [9] P. Horsfield and A. M. Bratkovsky, J. Phys.: Condens. Matter 12, R1,2000.
- [10] M. Kossow; Annal. Phys :Quantum field theory and composite fermions in the fractional quantum Hall effect ,18N5 ;285-377 ,2009.
- [11] R. M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods , Cambridge UniversityPress, Cambridge, 2004.





1

présentation de la théorie des ondelettes

Les ondelettes sont des méthodes analytiques mathématiques, les ondelettes sont utilisées afin de décomposer une fonction réelle (signal) en une combinaison linéaire de fonctions élémentaires (ondelettes). Il existe plusieurs familles d'ondelettes, et elles ont plusieurs applications. Le principe de cette théorie repose sur le travail de Fourier relatif à la décomposition d'un signal sur un ensemble de fonctions harmoniques et que nous allons rappeler [1].

1.1. La transformée de Fourier :**1.1.1 Analyse de Fourier :**

En 1822[2], J. Fourier a introduit une nouvelle notion que nous appelons analyse de Fourier. C'est une méthode qui peut représenter des signaux périodiques[3].

➤ Formalisme :

Soit une fonction $f(x)$ définie sur un intervalle $[a, b]$, alors $f(x)$ peut s'écrire comme combinaison des vecteurs de la base $\{\varphi_j\}$. Elle s'écrira de la forme [4]:

$$f = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \varphi_j \quad (1.1)$$

Où c_j sont les coefficients de Fourier, s'écrira de la forme:

$$c_j = (f, \varphi_j) = \int_a^b f(x) \varphi_j(x) dx \quad (1.2)$$

Une série trigonométrique est de la forme :

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin nx \quad (1.3)$$

Si cette fonction f périodique sur un intervalle $[-L, +L]$, alors elle est définie comme la série trigonométrique:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos n\left(\frac{\pi}{L}x\right) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin n\left(\frac{\pi}{L}x\right) \quad (1.4)$$

Avec les coefficients de Fourier a_n et b_n définis par[5] :

$$a_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cos n \left(\frac{\pi}{L} x \right) dx \quad (1.5)$$

$$b_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin n \left(\frac{\pi}{L} x \right) dx \quad (1.6)$$

Le fait que les séries permettent de représenter uniquement les fonctions périodiques, on va avoir besoin d'un nouvel outil pour représenter les fonctions ayant une variation localiser sur intervalle fini de l'espace de définition.

1.1.2 Transformée de Fourier :

La transformée de Fourier est une transformation qui passe pour un signal d'une représentation à une autre [6-8].

On appelle transformée de Fourier de la fonction, f , la fonction [9]:

$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cdot e^{-i2\pi\nu t} dt \quad (1.7)$$

Cette fonction représente le spectre en fréquences de la fonction f .

La transformée de Fourier inverse s'écrit comme suit [10]:

$$F(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\nu) \cdot e^{i2\pi\nu t} d\nu \quad (1.8)$$

Ces formules montrent que pour le calcul d'une valeur fréquentielle $F(\nu)$, il est nécessaire de connaître toute l'histoire temporelle de $f(t)$ de $-\infty$ à $+\infty$.

Malgré, l'utilisation très abondante de cette transformation, elle présente plusieurs inconvénients au niveau de son interprétation physique et son domaine d'application. On peut en citer quelques uns [11]:

- 1- la disparition de l'aspect temporel : qui nous montre l'absence totale de la localisation temporelle. dans la transformation de Fourier qui engendre une difficulté à donner une interprétation physiquement acceptable aux signaux ou phénomènes étudiés.

- 2- la non-causalité : il faut connaître tout le signal f pour pouvoir calculer F , l'analyse en temps réel est impossible.
- 3- Principe d'incertitude d'Heisenberg-Gabor[12] : Bien qu'il fût découvert par Heisenberg en 1925 en mécanique quantique, son formalisme en traitement du signal a été établi par Gabor en 1946.

Il est donné par :

$$\Delta t \cdot \Delta \nu \geq \frac{1}{4\pi}$$

Cette expression exprime le fait que des supports éphémères en temps et en fréquence ne peuvent coexister. A un signal bref en temps, correspond un spectre fréquentiel très étendu.

1.1.3 Transformée de Fourier rapide :

Cette transformée est basée sur un algorithme que nous allons présenter .

Il permet de calculer d'une façon très rapide et de minimiser le nombre d'opération nécessaire à effectuer sur un signal discret. Reprenons l'équation de la transformée de Fourier discrète donnée par [13]:

$$S(k) = \sum_{n=0}^{N-1} s(n) \exp\left(-\frac{2i\pi kn}{N}\right); \quad (k=0,1,\dots,N-1) \quad (1.9)$$

Et posons:

$$W_N = \exp(-2i\pi/N)$$

Donc :

$$W_N^k = \exp(-2i\pi k/N) \quad (1.10)$$

Donc la transformée de Fourier discrète prend la forme suivante :

$$S(k) = \sum_{n=0}^{N-1} s(n) W_N^{kn} \quad (k=0,1,\dots,N-1) \quad (1.11)$$

Avec une forme matricielle on aura:

$$\begin{bmatrix} S(0) \\ S(1) \\ S(2) \\ S(3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \dots \\ 1 & W^1 & W^2 & W^3 & \dots \\ 1 & W^2 & W^4 & W^6 & \dots \\ 1 & W^4 & W^6 & W^9 & \dots \\ & & \vdots & & \\ & & \vdots & & \\ & & \vdots & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s(0) \\ s(1) \\ s(2) \\ s(3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (1.12)$$

La matrice inverse a la même structure :

$$\begin{bmatrix} s(0) \\ s(1) \\ s(2) \\ s(3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \dots \\ 1 & W^{-1} & W^{-2} & W^{-3} & \dots \\ 1 & W^{-2} & W^{-4} & W^{-6} & \dots \\ 1 & W^{-4} & W^{-6} & W^{-9} & \dots \\ & & \vdots & & \\ & & \vdots & & \\ & & \vdots & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S(0) \\ S(1) \\ S(2) \\ S(3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (1.13)$$

Les équations matricielles nécessitent N^2 multiplications et autant d'additions ce qui est énorme. En 1965 Cooley et Tuckey [14] ont proposé un algorithme permettant de calculer très rapidement des transformées de Fourier discrètes en ramenant le calcul d'une transformée de longueur N à celui de deux transformées de longueur $N/2$.

Pratiquement, cela revient à décomposer le signal $s(n)$ en deux signaux :

$$\begin{cases} s'(n) \equiv s(2n) \left(n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1 \right) \\ s''(n) \equiv s(2n + 1) \left(n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1 \right) \end{cases} \quad (1.14)$$

On obtient alors :

$$S(k) = \sum_{n=0}^{N/2-1} s(2n)W^{2kn} + \sum_{n=0}^{N/2-1} s[(2n + 1)]W^{k(2n+1)} \quad (1.15)$$

$$\Rightarrow S(k) = \sum_{n=0}^{N/2-1} s'(n)(W^2)^{kn} + W^k \sum_{n=0}^{N/2-1} s''(n) (W^2)^{kn} \quad (1.16)$$

Pour $k=0,1,\dots,N/2-1$, les deux sommes sont les transformées de Fourier discrètes des deux signaux s' et s'' .

Posons $k=l+N/2$, les deux sommes peuvent être réécrites sous la forme suivante :

$$S[(l + N/2)] = \sum_{n=0}^{N/2-1} s'(n)(W^2)^{n(l+N/2)} + W^{l+N/2} \sum_{n=0}^{N/2-1} s''(n)(W^2)^{n(l+N/2)} \quad (1.17)$$

$$S[(l + N/2)] = \sum_{n=0}^{N/2-1} s'(n)(W^{nN})(W^2)^{nl} + W^{N/2} W^l \sum_{n=0}^{N/2-1} s''(n)(W^{nN})(W^2)^{nl} \quad (1.18)$$

Mais $W^{nN}=1$ et $W^{N/2}=-1$, ce qui permet d'obtenir la forme simplifiée suivante :

$$S[(k + N/2)] = S'_2(k) - S''_2(k)W^k$$

Avec: $k = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1.$

$$\text{Ou : } \begin{cases} S'_2(n) = 2 \sum_{n=0}^{N-1} s'(n)(W^2)^{nl} \\ S''_2(n) = \sum_{n=0}^{N-1} s''(n)(W^2)^{nl} \end{cases} \quad (1.19)$$

On a donc réduit le calcul de la transformée de Fourier discrète d'une série de N valeurs à celui de deux transformées de séries de N/2 valeurs. Si $N=2^p$, l'on peut effectuer cette réduction p fois et commencer le processus en calculant les transformées de Fourier discrètes de N séries ne comportant qu'une valeur, puis celles des séries de deux valeurs, puis 4, etc. jusqu'à la série complète. On remarque que le nombre d'opération est réduit : cet algorithme permet de calculer la transformée d'une série de N valeurs en seulement $2N^p$ opérations contre $2N^2$ pour l'algorithme direct utilisé.

Le sous-programme suivant, en langage FORTRAN, met en œuvre l'algorithme de transformation de Fourier rapide [29] :

```
%Porg.T. Fourier rapide.
Subroutine TFR_diriv_signal_n_
Subroutine TFR(dirinv_signal,n)
Integer n,i,j,k,m,i step
Real dirinv,scale,arg
Complex signal(n),cmplx,cw,cdel,et
```

```
Do i=1,n
Signal(i)=signal(i)*scale
End do
J=1
K=1
Do i=1,n
If (i.le.j)then
Ct =signal (j)
Signal(j)=signal(i)
Signal (i)=ct
End if
M=n/2
Do while (j.gt.m.aand.m.gt.1)
=j-m
End do
M=n/2
Do while (j.gt.m.aand.m.gt.1)
=j-m
End do
Do while(k.ge.n)
I step=2*k
Cw=1
Arg=divinv*3.14159265/float(k)
Cdel=cplx(cos(arg),sin(arg))
Do m=1,k
Do i=m,n, I step
Ct=cw*signal (i+k)
Signal (i+k)=signal(i)-ct
Signal (i)=signal (i)+ct
Cw=cw*cdel
End do
K=I step
End do
End do
```

1.1.4 La transformée de Gabor:

En 1946[14], Gabor a voulu mesurer les variations fréquentielles des sons mais comme on l'a déjà vu le caractère global de la transformée de Fourier ne le permet pas. Pour pallier à ce problème l'idée qu'il eut, était tout simplement de localiser l'analyse avec une fenêtre symétrique autour d'une position temporelle (Figure 1.1), de faire la transformée de Fourier, puis de recommencer sur toutes les positions possibles. C'est le principe de la transformée de Fourier à fenêtre ou encore appelée transformée de Gabor. Elle est définie par[15] :

Analyse

$$SFT(v, b) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cdot g_{v,b}(t) dt = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cdot g(t-b) \cdot e^{-i2\pi vt} dt \quad (1.20)$$

Synthèse

$$f(t) = \int_{\mathbb{R}^2} SFT(v, b) \cdot g_{v,b}(t) \cdot dv db \quad (1.21)$$

Avec :

$$g(t) = e^{-\pi t^2} \quad (1.22)$$

$g_{v,b}(t)$ est appelée atome de la transformée, la notation SFT « short Fourier transform ».

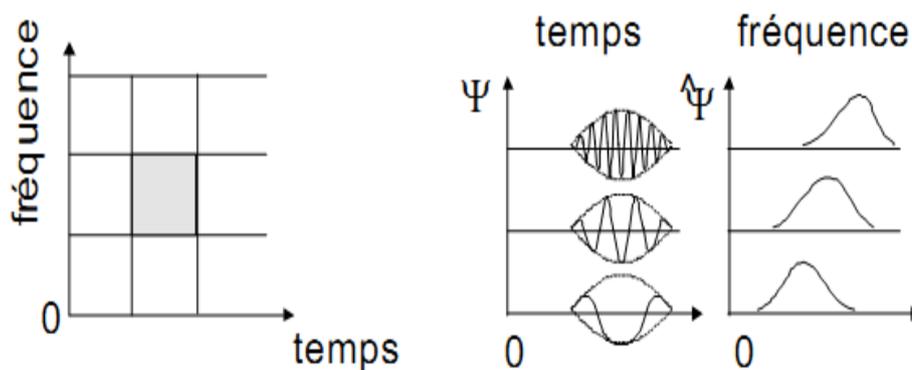


Figure.1.1: Fenêtres temps-fréquence utilisées dans l'analyse de Gabor

En fait dans la pratique on écrira :

$$SFT_f(\nu, b) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cdot g_{\nu, b}^*(t) dt = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi) \cdot g^*(\xi - \nu) e^{-i2\pi \cdot (\xi - \nu) b} d\xi \quad (1.23)$$

qui s'obtient à partir des précédents par une multiplication par $e^{i2\pi\nu b}$ et une redéfinition de la fenêtre. Les nouveaux coefficients forment la transformée de Gabor $SFT_f(\nu, b)$ de $f(t)$. En traitement du signal, cette dernière relation, montre que l'atome $g_{\nu, b}(t)$ joue le rôle de la réponse impulsionnelle d'un filtre sélectif à la fréquence ν . Ainsi, la SFT peut être interprétée comme une batterie de filtres de même gabarit, décalés en fréquence.

Le défaut majeur de cette transformée est une résolution temporelle fixe, la fenêtre est de taille constante. Par conséquent, elle ne permet pas une analyse à la fois locale en temps et précise en fréquence (principe d'incertitude). Pour corriger cette défaillance, on a recours à une transformée qui s'adapte mieux au plan temps-fréquence, c'est la transformée en ondelettes.

1.2. La transformée en ondelette :

La théorie des ondelettes est récente, elle est née au milieu des années 80 [16].

1.2.1. Historique :

Une ondelette signifie une petite onde selon le géophysicien Morlet et le physicien Croate Grossman [17]. La petite dimension se rapporte à la condition que cette fonction est de fenêtre à longueur finie.

- L'onde se rapporte à la condition que cette fonction est oscillante.
- Une ondelette est une onde localisée.
- La décomposition d'une fonction en série de Fourier est faite en fréquence.

La caractéristique d'une décomposition en ondelette est d'ajouter une dimension c'est-à-dire en fréquence et en espace [18].

- L'idée générale sur laquelle est basée la méthode d'ondelettes est la transformée de Fourier à fenêtre glissante pour traiter le problème de localisation temps-fréquence, en

multipliant le signal pour une fonction localisée en temps (fenêtre) ensuite on applique la transformée de Fourier[19].

- La théorie des ondelettes peut être appliquée dans de nombreux domaines que ce soit théorique ou pratique, citons : analyse harmonique[20], vision ordinateur[21], traitement du signal[22], compression d'images, analyse de turbulences, etc.

1.2.2. Ondelette et la transformée en ondelette :

La transformée en ondelette a pour similitude la transformée de Gabor sauf que la fonction h fenêtre, devient variable[23].

➤ Définition d'une ondelette :

Ce sont des familles de fonctions déduites d'une même fonction, appelée ondelette mère, par des opérations de dilatation, translation et rotation en dimension supérieure à 1. Une ondelette doit être localisée en temps et en fréquence ceci se traduit par la condition d'admissibilité suivante[24] :

$$C_{\psi} = \int \frac{|\hat{\psi}(w)|^2}{|w|^n} d^n w < \infty \quad (1.24)$$

Tel que :

$$|w| = |w_1^2 + w_2^2 + \dots + w_n^2|^{1/2} \quad (1.25)$$

Donc ψ est admissible.

➤ Dans le cas ou $n=1$, C_{ψ} s'écrit :

$$C_{\psi} = \int \frac{|\hat{\psi}(w)|^2}{|w|} dw < \infty \quad (1.26)$$

Cette condition a pour conséquence que l'ondelette est une fonction d'énergie finie.

➤ Propriétés d'ondelettes

Si ψ est admissible alors :

$$\hat{\psi}(0) = 0 \quad (1.27)$$

$$\text{Soit : } \int \psi(x) d^n x = 0. \quad (1.28)$$

Ceci implique que cette fonction est ondulante.

➤ **Familles d'ondelettes :**

On peut définir à partir de l'ondelette mère une famille d'ondelette $\psi_{a,b,r}$ par opération de dilatation, translation et rotation tel que[25] :

$$\psi_{a,b,r}(x) = \frac{1}{a^{\frac{n}{2}}} \psi\left(\frac{1}{a} r^{-1}(x - b)\right) \quad (1.29)$$

a : facteur d'échelle.

b : facteur de translation.

r : opérateur de rotation.

1.1.3 La transformée en ondelettes continues :

La transformée en ondelettes d'une fonction est une décomposition de cette fonction sur la base $\psi_{a,b,r}$.

La transformée en ondelette continue est donnée par[24] :

$$W_f(a, b, r) = \frac{1}{\sqrt{C_\psi}} \int f(x) \overline{\psi}_{a,b,r}(x) d^n x \quad (1.30)$$

$\frac{1}{\sqrt{C_\psi}}$: est le facteur de normalisation.

$W_f(a, b, r)$: coefficients d'ondelettes.

➤ **Cas unidimensionnel :**

Soit une fonction $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, suffisamment régulière et bien localisée. Elle sera appelée « ondelette » si elle satisfait à la condition suffisante d'admissibilité suivante :

Cette dernière expression montre que ψ doit avoir au moins un ou plusieurs moments nul, ce qui lui confère un caractère oscillant comme une onde, d'où le nom d'ondelette.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \cdot dx = 0$$

A partir de cette unique fonction qu'on appellera dorénavant « ondelette mère », on construit une famille de fonctions qui sont les atomes de base [25] :

$$\psi_{a,b}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \psi \left(\frac{x-b}{a} \right) \quad \text{avec } a \in \mathbb{R}^+, b \in \mathbb{R} \quad (1.31)$$

a et b sont appelés facteur d'échelle et facteur de translation respectivement.

* **Remarque**[26] :

En général, le facteur d'échelle a est pris strictement positif. Cependant, il peut prendre des valeurs négatives, par analogie aux fréquences négatives de l'analyse de Fourier.

La transformée continue en ondelette d'une fonction f est donnée par :

$$W_f(a,b) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot \overline{\psi_{a,b}(x)} dx \quad (1.32)$$

On peut écrire cette transformée comme un produit de convolution :

$$W_f(a,b) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot \frac{1}{\sqrt{a}} \overline{\psi \left(\frac{x-b}{a} \right)} dx \quad (1.33)$$

► **Quelques propriétés**[27] :

1. Conservation de l'énergie : soit ψ une ondelette analysante et f une fonction de $L^2(\mathbb{R}^n)$ alors:

$$\int |f(x)|^2 dx = \iint |W_f(a,b)|^2 \frac{1}{a^2} da db \quad (1.34)$$

2. L'inverse :

$$f(x) = \iint \psi_{a,b}(x) W_f(a,b) \frac{1}{a^2} da db \quad (1.35)$$

3. Linéarité, translation, dilatation et rotation

- La transformée en ondelettes est linéaire :

$$W(\alpha f_1 + \beta f_2) = \alpha W(f_1) + \beta W(f_2) \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}^2, (f_1, f_2) = L^2(\mathbb{R}^2) \quad (1.36)$$

- Translation :

la transformée en ondelettes est invariante par translation et on a :

$$W(\tau_{b'} f)(a, b) = Wf(a, b - b') \quad (1.37)$$

tel que , $\tau_{b'}$: la translation de f par le vecteur b' .

- Dilatation :

la transformée en ondelette a également la propriété de dilatation tel que :

$$W(\delta_k f)(a, b) = k^{-n/2} Wf(ka, kb) \quad (1.38)$$

Avec :

$$\delta_k f(x) = f(kx).$$

Cette propriétés liée à l'échelle est très utile pour l'analyse des fractales.

Afin de s'affranchir du facteur de dilatation $k^{-n/2}$, la normalisation \mathbb{R} de la famille d'ondelettes peut s'avérer extrêmement importante. En effet, ceci conduit à une propriété d'invariance par dilatation.

$$W(\delta_k f)(a, b) = Wf(ka, kb) \quad (1.39)$$

-Rotation :

la transformé en ondelette a également la propriétés de rotation tel que :

$$W(R_{r_0} f)(a, b) = Wf(a, r_0^{-1}(b)) \quad (1.39)$$

$$\text{Où : } R_{r_0} f(x) = f(r_0^{-1}(x)).$$

1.2.4. La transformée en ondelettes discrètes :

Dans ce cas on propose de discrétiser des paramètre de dilatation comme suit[28] :

$$\begin{cases} a_j = a_0^j & j \in \mathbb{Z} \text{ et } a_0 > 1 \\ b_k = kb_0 a_0^j & k \in \mathbb{Z} \text{ et } b_0 > 0 \end{cases} \quad (1.40)$$

La famille d'ondelette s'écrit alors :

$$\psi_{j,k}(x) = a_0^{-\frac{j}{2}} \psi(a_0^{-j} x - kb_0) \quad (1.41)$$

Chaque ondelette est concentrée sur l'intervalle $[a^j kb_0, a^j (k+1)b_0[$ alors la transformée d'ondelette discrète s'écrit par la formule :

$$Wf(a_j, b_k) = \frac{a_0^{-\frac{j}{2}}}{\sqrt{c_\psi}} \int f(x) \bar{\psi}(a_0^{-j} x - kb_0) dx \quad (1.42)$$

Alors si $\psi_{j,k}$ constituent une frame alors :

$$\frac{b_0 L_n a_0}{\pi} A \leq \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\hat{\psi}(\varepsilon)|^2}{|\varepsilon|} d\varepsilon \leq \frac{b_0 L_n a_0}{\pi} B \quad (1.43)$$

Avec

$A > 0$ et $B < \infty$, A et B sont appelés les bornes de la structure.

1.2.5. Avantage de la transformée en ondelettes[29] :

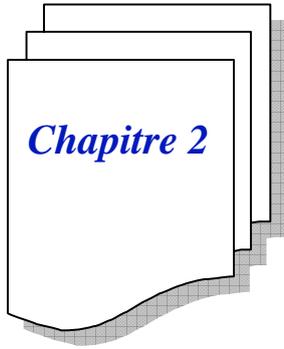
- Pour les signaux présentant des variations très rapides des sa
- uts, des marches, bref des discontinuités . la transformée en ondelette est bien adaptés car l'ondelette peut détecter ces variations.
- la transformée en ondelettes permet de représenter complètement et efficacement un signal en peu de coefficients.
- Une brusque variation d'un signal produit un grand coefficient d'ondelette alors que pour un signal continu on obtient peu de coefficients.

Références

- [1] R. B. Da'od Ismirate, Thèse : Data Compression with Wavelets, U.A.P, Ablus, 10-50, Palestine, 2009.
- [2] J.-Luc Raimbault : Analyse de Fourier L3/M1, lpp.polytechnique, 3-30; 2008.
- [3] J. Kahane, P. Lemmarie: Fourier series and Wavelets. Amsterdam OPA (Overseas Publishers Association); pp. 394, 1995.
- [4] L. Boggess, Narcowich. F: A First Course in Wavelets with Fourier Analysis. pp 292; 2001.
- [5] J. Walker: Fourier series. Academic Press, Encyclopedia of physical science & Technology; University of Wisconsin, 2004.
- [6] W. Briggs, L. Henson: The DFT, An Owner's Manual for the Discrete Fourier Transform, Siam, 1995.
- [7] V. Perrier, : Application de la théorie des ondelettes, ENIT, 2005.
- [8] R. Burden, J. Faires: Numerical Analysis, Brooks Cole, 2004.
- [9] J. Gomes, L. Velho, Course Organizers: From Fourier Analysis to Wavelets, Instituto de Matematica P. Aplicada, IMP. Janeiro, Brazil, pp. 26, 1999.
- [10] M. Pinsky : Introduction to Fourier Analysis and Wavelets. United State of America: Wadsworth Group; pp 387; 2002.
- [11] I. Daubechies, Ten lectures on Wavelets, SIAM, Philadelphia, PA, 1992.
- [12] A. Yger; Math.appl; Thèse : Traitement du signal et ondelettes; pp. 30-41 ; 2006.

- [13] L. Vandendorpe, ELEC 2900: Traitement des signaux ; pp99-103; Université catholique de Louvain ; 2007.
- [14] C. Goswami et A.K-Chan : Fundamentals of Wavelets , Theory, Algorithms, and Applications. Wiley Series in Microwave and Optical Engineering. Wiley Interscience, 1999.
- [15] P. Søndergaard; Appl. Math: Finite Discrete Gabor Analysis Institut for Matematik – DTU ; 2007.
- [16] D. Camille, Thèse de doctorat: Contribution à l'intégration sur silicium de la transformée en ondelettes Application au traitement d'images ; l'université Montpellier II ; pp.16-17 ; 2000.
- [17] C. Burrus, R.A -Gopinath, H. Guo: Introduction to Wavelets and Wavelet Transforms, A Primer, Théorie de l'information, 1997.
- [18] U.S-River, N.J. (USA): Prentice Hall, Wavelet Representation. NJ (USA), IEEE, 1998.
- [19] H. Adeli, Z. Zhou; Journal of Neuroscience Methods: Analysis of EEG records in an epileptic patient using wavelet transform; 2003.
- [20] C. Portenier ; Math. Appl : ONDELETTES; Fachbereich Mathematik und Informatik Philipps-Universität Marburg; pp.70-93; 1998.
- [21] P. Valerie, Thèse: Methodes d'ondelettes pour la segmentation d'images Applications à l'imagerie médicale et au tatouage d'images, I. N. Pol.GRENOBLE ; 2003.
- [22] B. Hussein; Thèse: Mathematical Theory of Wavelets, An- Najah National University, pp. 2-8, 2009.

- [23] C. Portenier; Math. Appl : ONDELETTES; Fachbereich Mathematik und Informatik Philipps-Universität Marburg;pp. 70-93;1998.
- [24] L. Debnath. Wavelet transform and their applications. Boston: Birkhauser; pp. 575;2002.
- [25] M. Misiti; Yves M ;Wavlet Toolbox User's Guide; by The MathWorks, Inc. All Rights Reserved,pp. 5-30; 1997.
- [26] A.Simon; Thèse: Wavelet-based Adaptive Multiresolution Tools Applied to SpeechRecognition; University of Kaiserslautern; pp.54-66;2006.
- [27] M.Hussain; Thèse: Wavelets and Solution of Ordinary Differential,K. F. UNIVERSITY OF PETROLEUM;pp.2-20;2005.
- [28] T. H-Koornwinder; Wavelets: an elementary treatment of theory and applications;pp.27-49;World Scientific;1995.
- [29] M. Yezli, Mémoire de Magistère : Theories des ondelletes et les équations de Transport ; U.A.B.Tlemcen ;pp.2-20;2009.



A large rectangular box with a black border and a grey drop shadow. Inside the box, the text "ANALYSE MULTI-ÉCHELLE" is written in a blue, outlined, serif font, arched across the middle. The bottom right corner of the box is folded over, showing a grey shadow.



2

Analyse multi-échelle

L'analyse multi-résolution est un cadre fonctionnel qui permet de représenter une fonction comme une limite de ses approximations à différents niveaux de résolutions ou à des échelles successives [1, 2, 3].

Cette notion est très liée à celle de l'analyse temps-fréquence ou temps-échelle utilisée en traitement du signal [4, 5]. La représentation temps-fréquence qui se déduit de cette analyse permet d'observer un signal dans un espace intermédiaire entre l'espace temps et l'espace des fréquences.

Dans le cadre de l'imagerie une autre notion est adaptée c'est la notion d'espace-échelle.

2.1. Analyse multi-échelle ou multi-résolution:

Nous donnons ici la définition générale de l'analyse multi-échelle; telle que l'énonce Y. Meyer [6].

2.1.1. Définition générale :

Soit l'espace vectoriel des fonctions f de $L^2(\mathbb{R})$, telle que [7] :

$$\|f\| = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx \right)^{1/2} < \infty \tag{2.1}$$

Une analyse multi-résolutions (AMR) de $L^2(\mathbb{Z}^2)$ est une famille $M = \{V_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$ de sous espaces vectoriels emboîtés, une suite croissante $V_j \in \mathbb{Z}$, de sous espaces vectoriels fermés L^2 .

- La convention utilisée par Goedecker, Chui, Goswami[8], ... où l'indice caractérisant les espaces vectoriels croît avec la résolution:

$$1. \forall j \in \mathbb{Z}, V_j \subset V_{j+1}.$$

$$2. \bigcap_{j=-\infty}^{j=+\infty} V_j = \{0\}; \bigcup_{j=-\infty}^{j=+\infty} V_j = L^2(\mathbb{Z}^n);$$

$$3. \forall j \in \mathbb{Z}; f(x) \in V_j \Leftrightarrow f(2x) \in V_{j+1};$$

$$4. \forall k \in \mathbb{Z}^n; f(x) \in V_0 \Leftrightarrow f(x-k) \in V_0;$$

5. Il existe une fonction $\phi \in V_0$ telle que :

$$V_0 = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}) : f(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \alpha_k \cdot \phi(x-k) \right\}$$

$\{\phi_k, k \in \mathbb{Z}\}$ est une base "stable" de V_0 , c'est-à-dire que :

$$A \|f\|^2 \leq \sum_k \alpha_k^2 \leq B \|f\|^2$$

Constantes $A, B \in \mathbb{R}_+^*$

V_j est appelé l'espace d'approximation.

Chaque V_j lui est associé une résolution 2^j et l'approximation d'un signal $f(t)$ à cette résolution est obtenue par projection sur le sous-espace correspondant.

2.1.2.Cas dyadique :

Dans le cas dyadique, deux relations, caractérisant toute fonction $f(x)$ appartenant à un espace vectoriel donné, définissent les propriétés de dilatation :

$$f(x) \in V_j \Leftrightarrow f(2x) \in V_{j+1}$$

et les propriétés de translation :

$$f(x) \in V_0 \Leftrightarrow f(x+1) \in V_{j+1}$$

Dès lors, si l'on peut trouver une fonction ϕ de V_0 telle que $\{\phi(-k)\}_{k \in \mathbb{Z}}$ soit une base de Riesz de V_0 , alors [9] :

$$\forall j \in \mathbb{Z}, \{\phi_{j,k}(x) / \phi_{j,k}(x) = 2^{j/2} \phi(2^j x - k)\}_{k \in \mathbb{Z}} \quad (2.2)$$

est une base de Riesz de V_j . Le facteur $2^{j/2}$ dans la définition des $\phi_{j,k}$ permet de conserver la normalisation indépendamment du niveau de résolution.

comme ϕ apparait à V_0 et V_0 inclus dans V_1 , il en résulte que l'on peut exprimer ϕ comme combinaison linéaire, donc il existe une suite de réels $\{h_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ telle que :

$$\phi(x) = \sqrt{2} \sum_k h_k \phi(2x - k) \quad (2.3)$$

L'intégration de l'équation (2.1) sachant que la fonction d'échelle est normalisée à 1, permet de déduire que la suite (h_k) vérifie [10] :

$$\sum_k h_k = \sqrt{2} \quad (2.4)$$

La fonction d'échelle est complètement déterminée par l'équation (2.1) et la condition de normalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) dx = 1 \quad (2.5)$$

L'espace V_j engendré par la famille $\{\phi_{jk} := 2^{j/2} \phi(2^j x - k) : k \in \mathbb{Z}\} \forall j \in \mathbb{Z}$

servira à approximer les fonctions en calculant les projections de celles-ci sur V_j . Alors toute fonction, élément de $L^2(\mathbb{R}^2)$, peut être approximée en calculant ses projections. Pour pouvoir approximer les fonctions constantes il faut supposer que la fonction d'échelle et ses translatées forment une partition de l'unité [11] :

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} \phi(x - k) = 1 \quad (2.6)$$

➤ *Obtention de bases orthonormales de $L^2(\mathbb{R})$:*

Considérons une AMR de $L^2(\mathbb{P})$ Comme $V_j \subset V_{j+1}$ on peut compléter l'espace V_j par un espace noté W_j l'espace complémentaire de V_j dans V_{j+1} et on écrira [12] :

$$L^2(\mathbb{R}) = \overline{\bigcup_{j \geq 0} V_j} = V_0 \oplus_{j=0}^{\infty} W_j \quad (2.7)$$

Par définition, l'espace W_j contient l'information manquante lors du passage de V_j à V_{j+1} donc c'est l'espace des détails à l'échelle j .

Donc pour tout $j \in \mathbb{Z}$, W_j est défini par :

$$V_{j+1} = V_j \oplus W_j = V_{j-1} \oplus W_{j-1} \oplus W_j = \dots = V_0 \oplus W_0 \oplus W_1 \oplus \dots \oplus W_j \quad (2.8)$$

$$V_{j+1} = V_0 \oplus_{l=0}^j W_l \quad (2.9)$$

D'où:

$$L^2(\mathbb{R}) = \overline{\bigcup_{j \geq 0} V_j} = V_0 \oplus_{j=0}^{\infty} W_j \quad (2.10)$$

Soit une AMR $\{V_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$. Comme $\forall j \in \mathbb{Z}, V_j \subset V_{j+1}$, il existe W_j et $V_j \cap W_j = \{0\}$.

W_j est le supplémentaire de V_j dans V_{j+1} . Dès lors, si l'on peut trouver une fonction ψ dans W_0 , telle que $\{\psi(-k)\}_{k \in \mathbb{Z}}$ soit une base de W_0 , alors ψ est appelée ondelette associée à AMR $\{V_j\}_{j \in \mathbb{P}}$, et dans le cas dyadique

$$\forall j \in \mathbb{Z}, \{\psi_{j,k}(x) / \psi_{j,k}(x) = 2^{j/2} \psi(2^j x - k)\}_{k \in \mathbb{Z}} \quad (2.11)$$

forme une base de W_j , appelé aussi espace des détails.

Ainsi en notant pour tout j , $(\psi_{j,k})_{k \in \mathbb{Z}}$ une base de W_j , toute fonction de $L^2(\mathbb{R})$ peut s'écrire comme la série convergente dans $L^2(\mathbb{R})$:

$$f(x) = \sum_k a_k \phi_{0k}(x) + \sum_{j=0}^{\infty} \sum_k \beta_{jk} \psi_{j,k}(x) \quad (2.12)$$

Les coefficients sont donnés par :

$$\begin{cases} a_k = \int f(x) \phi_{0k}^*(x) dx \\ \beta_{jk} = \int f(x) \psi_{jk}^*(x) dx \end{cases} \quad (2.13)$$

la fonction ψ est appelée ondelette.

Donc à tout niveau de résolution $j \in \mathbb{Z}$, la famille $\psi_{jk}(x)$ forme une base orthonormée de W_j , et d'une manière similaire comme W_0 est inclus dans V_1 ; il existe une suite de réels (g_k) telle que :

$$\begin{cases} \psi(x) = \sqrt{2} \sum_k g(k) \phi(2x - k) \\ \phi(x) = \sqrt{2} \sum_k h(k) \phi(2x - k) \end{cases} \quad (2.14)$$

Avec :

$$g(k) = (-1)^k \overline{h_{1-k}}, \quad (2.15)$$

Cette relation s'appelle relation à deux échelles.

2.1. Orthogonalité, bi-orthogonalité :

Soient deux AMR duales $\{V_j\}_{j \in \mathbb{R}}$ et $\{\tilde{V}_j\}_{j \in \mathbb{R}}$ engendrées par les fonctions d'échelle duales ϕ et $\tilde{\phi}$, dotés des sous-espaces complémentaires $\{W_j\}_{j \in \mathbb{R}}$ et $\{\tilde{W}_j\}_{j \in \mathbb{R}}$ engendrés par des ondelettes ψ et $\tilde{\psi}$.

On dit alors que ψ et $\tilde{\psi}$ sont duales l'une de l'autre. On a donc :

$$\forall j, j', k, k' \in \mathbf{R}, \langle \phi_{j,k} | \tilde{\phi}_{j',k'} \rangle = \langle \psi_{j,k} | \tilde{\psi}_{j',k'} \rangle = \delta_{j,j'} \delta_{k,k'} \quad (2.16)$$

On dit que V_j est une ondelette orthogonale si et seulement si $\forall j \in \mathbb{Z}, V_j = \tilde{V}_j$ et

$W_j = \tilde{W}_j$ Les translatées dilatées de ϕ forment alors des bases orthonormales des V_j , et celles de ψ des bases orthonormales des W_j .

On a alors $V_j = V_j \oplus W_j$, $V_j \perp W_j$ et on peut prendre $\{\tilde{\psi}, \tilde{\phi}\} = \{\psi, \phi\}$

Dans le cas dyadique, une fonction ψ de L^2 est une ondelette orthogonale si et seulement si l'ensemble des fonctions, $\{\psi_{j,k} / \psi_{j,k}(x) \equiv 2^{j/2} \psi(2^j x - k)\}_{k \in \mathbb{Z}}$ forme une base orthonormée de L^2 .

On dit que deux ondelettes duales ψ et $\tilde{\psi}$ sont bi-orthogonales si et seulement si :

$$\forall j \in \mathbf{R}, V_{\tilde{j}} \perp W_j \quad \text{et} \quad V_j \perp W_{\tilde{j}}$$

C'est-à-dire

$$\forall j, j', k, k' \in \mathbf{R}, \langle \tilde{\phi}_{j,k} | \psi_{j',k'} \rangle = \langle \phi_{j,k} | \tilde{\psi}_{j',k'} \rangle = 0 \quad (2.17)$$

Pour établir que deux ondelettes sont biorthogonales, il est suffisant de montrer que :

$$\forall l \in \mathbf{R}, \langle \tilde{\phi} | \psi(-l) \rangle = \langle \tilde{\psi} | \phi(-l) \rangle = 0 \quad (2.18)$$

Une propriété intéressante des ondelettes est le nombre de moments nuls définie par le plus grand nombre L tel que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^s \psi_{j,k}(x) dx = 0 \quad \text{pour} \quad 0 \leq s < L. \quad (2.19)$$

Quand L augmente, il est prévu que les coefficients de projection d'une fonction diminue.

Dans notre problème, en raison de la périodicité du potentiel du cristal, nous devons modifier les ondelettes classiques de manière périodique.

Nous pouvons donc définir des ondelettes périodiques et d'échelles comme suit:

$$\begin{cases} \psi^{per}_{j,k}(x) = 2^{j/2} \sum_{k \in \square} \psi(2^j(x+k) - n) \\ \phi^{per}_{j,k}(x) = 2^{j/2} \sum_{k \in \square} \phi(2^j(x+k) - n) \end{cases} \quad (2.20)$$

Il est utile que la définition ci-dessus ne modifie pas les propriétés de bi-orthogonalité.

➤ **Utilité des propriétés d'ondelettes:**

Une propriété importante d'ondelettes, nous avons utilisé ensembles orthogonaux. la relation de bi-orthogonales est définie par:

$$\begin{cases} \langle \phi_{j,k} | \phi_{j',k'} \rangle = \delta_{k'-k} \\ \langle \psi_{j,k} | \psi_{j',k'} \rangle = \delta_{k'-k} \delta_{j'-j} \end{cases} \quad j, j', k', k \in \mathbf{R} \quad (2.21)$$

Il est important de mentionner que si les ondelettes sont à support fini alors les lemmes suivants sont vérifiées :

Lemme I:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{j,k}(x) \phi_{j',k'}(x) dx = \frac{1}{2} \phi_{j,k}^2(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0 \Rightarrow \langle \phi_{j,k} | \phi_{j',k'} \rangle = 0 \quad (2.22)$$

Lemme II:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{j,k}(x) \phi'_{j',k'}(x) dx &= \phi_{j,k}(x) \phi_{j',k'}(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \phi'_{j,k}(x) \phi_{j',k'}(x) dx \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \phi'_{j,k}(x) \phi_{j',k'}(x) dx \Rightarrow \langle \phi_{j,k} | \phi'_{j',k'} \rangle = - \langle \phi'_{j,k} | \phi_{j',k'} \rangle \end{aligned} \quad (2.23)$$

Lemme III:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{j,k}(x) \phi''_{j',k'}(x) dx &= \phi_{j,k}(x) \phi'_{j',k'}(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \phi'_{j,k}(x) \phi'_{j',k'}(x) dx \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \phi'_{j,k}(x) \phi'_{j',k'}(x) dx \Rightarrow \langle \phi_{j,k} | \phi''_{j',k'} \rangle = - \langle \phi'_{j,k} | \phi'_{j',k'} \rangle \end{aligned} \quad (2.24)$$

Nous utiliserons ces lemmes dans la Chapitre 3.

2.3. Transformée orthogonales de Daubechies :

Soit $\{V_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$ une analyse multi résolution (AMR) et soit $\phi(x)$ sa fonction d'échelle et l'ensemble $\{\phi(n - x), n \in \mathbb{Z}\}$ forme une base ortho-normale pour V_0 .

Les relations à deux échelles sont données comme suit :

$$\phi(x) = \sum_{k=0}^{L-1} p_k \phi(2x - k) \quad (2.25)$$

et l'équation :

$$\psi(x) = \sum_{k=2-L}^L (-1)^k p_{1-k} \phi(2x - k) \quad (2.26)$$

$\phi(x)$: est la fonction d'échelle.

$\psi(x)$: est l'ondelette mère.

p_k : soit les coefficients du filtre d'ondelette.

Le support fondamental de la fonction d'échelle est l'intervalle $[0, L-1]$ et celui correspondant l'ondelette est l'intervalle $[1-L/2, L/2]$.

Daubechies propose ces coefficients p_k satisfaisant certaines conditions :

$$\sum_{k=0}^{L-1} p_k = 2 \quad (2.27)$$

$$\sum_{k=0}^{L-1} p_k p_{k-m} = \delta_{0,m} \quad (2.28)$$

$$\sum_{k=2-L}^1 p_{1-k} p_{k-2m} = 0 \quad (2.29)$$

$$\sum_{k=0}^{L-1} (-1)^k k^m p_k = 0 \quad m=0,1,\dots,L/2-1 \quad (2.30)$$

Où

$\delta_{0,m}$: est la fonction delta de Kronecker.

Pour aboutir à des algorithmes permettant de calculer les coefficients de connexion, il nous a fallu passer par ceux qui nous donnent les dérivées et les intégrales multiples de la fonction d'échelle.

➤ **Choix de fonction d'échelle de Daubechies:**

La fonction d'échelle de Daubechies ϕ associée à la fonction ondelette ψ de l'ordre L [20] est souvent choisi pour résoudre les équations différentielles partielles (EDP's) [17, 28],

parce qu'ils ont les propriétés suivantes:

- Les ondelettes sont directement issues de l'analyse multi-résolution [11] et ils forment une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R})$;
- Les fonctions d'ondelettes ψ ont des moments nuls L , cela signifie qu'elles reproduisent des polynômes jusqu'au degré L ; plus L sera grand, plus ϕ sera régulière et on a une meilleure approximation des solutions des EDP's.
- ϕ est à support compact, en raison de la construction du filtre h : si $h(n) = 0$ pour $n < 0$ et $n > 2L - 1$, $\text{support}(\phi) = \text{support}(\psi) = [0, 2L - 1]$.

Les ondelettes de Daubechies ont la propriété importante d'offrir le plus petit support pour un nombre L de moments nuls. En fait, plus le support de la base est petit, plus les calculs deviennent rapides.

2.3.1. Évaluation de la nième dérivée de $\phi(x)$:

On note par $\phi^n(x)$ la dérivée nième de la fonction d'échelle $\phi(x)$ donnée par :

$$\phi^n(x) = \frac{d^n \phi(x)}{dx^n} = \frac{d}{dx} \phi^{(n-1)}(x) \quad (2.31)$$

Avec:

$$\phi^{(0)}(x) = \phi(x).$$

En injectant l'équation à deux échelles (2.25) dans cette équation, nous avons :

$$\phi^{(n)}(x) = 2^n \sum_{k=0}^{L-1} p_k \phi(2x - k) \quad (2.32)$$

On substitue les valeurs $x=1,2,\dots,L-2$ dans l'équation précédente pour aboutir un système linéaire d'équations :

$$2^{-n}\phi = P\phi \quad (2.33)$$

Où

$$\phi = [\phi^{(n)}(1)\phi^{(n)}(2) \dots \phi^{(n)}(L-2)]^T \quad (2.34)$$

P est une matrice donnée par :

$$P = [p_{2j-k}]_{l \leq j, k \leq L-2} \quad (2.35)$$

La résolution du système revient à trouver le vecteur inconnu ϕ qui n'est autre que le vecteur propre de la matrice P correspondant à la valeur propre 2^{-n} .

2.3.2. Évaluation de moments $M_k^m(x)$:

M_k^i moment de ϕ_k , sont définies comme:

$$M_k^i(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^i \phi_k(x-k) dx \quad (2.36)$$

La fonction d'échelle $\phi_k(x)$ est normalisée par la définition de façon à ce que

$$M_0^0 = 1 \text{ et } M_j^0 = 0 \text{ pour toutes } j.$$

Latto et al[1], ont établi une formule explicite pour calculer les moments:

$$\begin{cases} M_j^i = \frac{1}{2(2^j-1)} \sum_{k=0}^i \binom{i}{k} j^{i-k} \sum_{l=0}^{k-1} \binom{k}{l} M_0^l \left(\sum_{j=0}^{L-1} p_j^{k-l} \right) \\ M_j^\lambda = \frac{1}{2(2^j-1)} \left(\sum_{j=0}^{L-1} \sum_{l=0}^j \binom{j}{l} p_j \cdot j^l \right) M_{j-l}^\lambda \end{cases} \quad (2.37)$$

$$\begin{cases} M_0^i = \frac{1}{2(2^i-1)} \sum_{l=0}^{i-1} \binom{i}{l} M_0^l \left(\sum_{i=0}^{L-1} p_i \cdot i^{i-l} \right) \\ M_j^i = \sum_{l=0}^i \binom{i}{l} j^{i-l} M_0^l \end{cases} \quad (2.38)$$

2.3.3.2-termes de Coefficients de Connexion des ondelettes :

Les coefficients de connexion sont définis par :

$$\Omega_l^{n_1 n_2} = \int_0^1 \phi^{(n_1)} \phi_l^{(n_2)} dx \tag{2.39}$$

Prenant les dérivés de la fonction d'échelle $\phi(x)$, en supposant qu'elle est n fois dérivable, donne

$$\phi^n(x) = 2^n \sum_{k=0}^{L-1} P_k \phi_k^{(n)}(2x) \tag{2.40}$$

En l'injectant dans le terme de connexion à 2-termes ci-dessus, Latto et al.[23] arrivent à

$$\Omega_l^{n_1 n_2} = 2^{n_1+n_2-1} \sum_{i,j} P_i P_{j-2l+i} \int_0^1 \phi^{(n_1)}(x) \phi_j^{(n_2)}(x) dx \tag{2.41}$$

qui, après simplification et l'examen de tous les $\Omega_l^{n_1 n_2}$ aboutissent à un système d'équations linéaires ayant $\Omega^{n_1 n_2}$ un vecteur colonne de composantes $2N-3$ de $\Omega_l^{n_1 n_2}$:

$$T \Omega^{n_1 n_2} = \frac{1}{2^{n-1}} \Omega^{n_1 n_2} \tag{2.42}$$

Avec :

$$\begin{cases} n := n_1 + n_2 \\ T_{i:j} = \sum_k P_k P_{j-2i+k} \end{cases} \tag{2.43}$$

Ce sont des équations que l'on appelle équations d'échelles .

Afin de rendre le système non homogène, une équation est ajoutée, qui est dérivée à partir des équations des moments de la fonction d'échelle ϕ .

C'est l'équation de normalisation

$$n! = (-1)^n \sum_l M_l^n \Omega_l^{0n} \tag{2.44}$$

Les coefficients de la forme Ω_l^{0n} sont facilement obtenus à partir de $\Omega_l^{n_1 n_2}$ en intégrant par parties n_l fois

$$\begin{aligned}\Omega_l^{n_1 n_2} &= \int_0^1 \phi^{(n_1)} \phi_l^{(n_2)} dx \\ \Omega_l^{n_1 n_2} &= \left[\phi^{(n_1-1)} \phi_l^{(n_2)} \right]_0^1 - \int_0^1 \phi^{(n_1-1)} \phi_l^{(n_2+1)} dx\end{aligned}\quad (2.45)$$

À cause de fonction à base d'ondelette à support compact, cela devient :

$$\Omega_l^{n_1 n_2} = - \int_0^1 \phi^{(n_1-1)} \phi_l^{(n_2+1)} dx \quad (2.46)$$

et après n_l intégrations.

$$\Omega_l^{n_1 n_2} = (-1)^{n_1} \int_0^1 \phi \phi_l^{n_2 + n_3} dx = (-1)^{n_1} \Omega_l^{0 n} \quad (2.47)$$

Enfin, le système sera :

$$\begin{pmatrix} T - \frac{1}{2^{n-1}} I \\ M^n \end{pmatrix} \Omega^{n_1 n_2} = \begin{pmatrix} 0 \\ n! \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

où

M^n : vecteur ligne avec tous les M_l^n .

2.3.4.3-termes de Coefficients de Connexion des ondelettes :

Les coefficients de connexion sont définis par :

$$\Omega_{lm}^{n_1 n_2 n_3} = \int_0^1 \phi^{(n_1)} \phi_l^{(n_2)} \phi_m^{(n_3)} dx \quad (2.49)$$

Prenant les dérivés de la fonction d'échelle $\phi(x)$, en supposant qu'elle est n fois dérivable, donne

En l'injectant l'équation(2.40) dans le terme de connexion à 3-termes ci-dessus, Latto et al.[23] arrivent à

$$\Omega_{lm}^{n_1 n_2 n_3} = 2^{n_1 + n_2 + n_3 - 1} \sum_{i,j,r} P_i P_{j-2l+i} P_{r-2m+i} \int_0^1 \phi^{(n_1)}(x) \phi_j^{(n_2)}(x) \phi_r^{(n_3)}(x) dx \quad (2.50)$$

qui, après simplification et l'examen de tous les $\Omega_{lm}^{n_1 n_2 n_3}$ aboutissent à un système d'équations linéaires ayant $\Omega^{n_1 n_2 n_3}$ un vecteur colonne de $\Omega_{lm}^{n_1 n_2 n_3}$:

$$T \Omega^{n_1 n_2 n_3} = \frac{1}{2^{n-1}} \Omega^{n_1 n_2 n_3} \quad (2.51)$$

Avec :

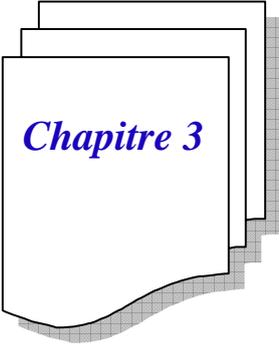
$$\begin{cases} n := n_1 + n_2 + n_3 \\ T_{i,l:m,j} = \sum_k P_k P_{m-2i+k} P_{j-2l+k} \end{cases} \quad (2.52)$$

Références

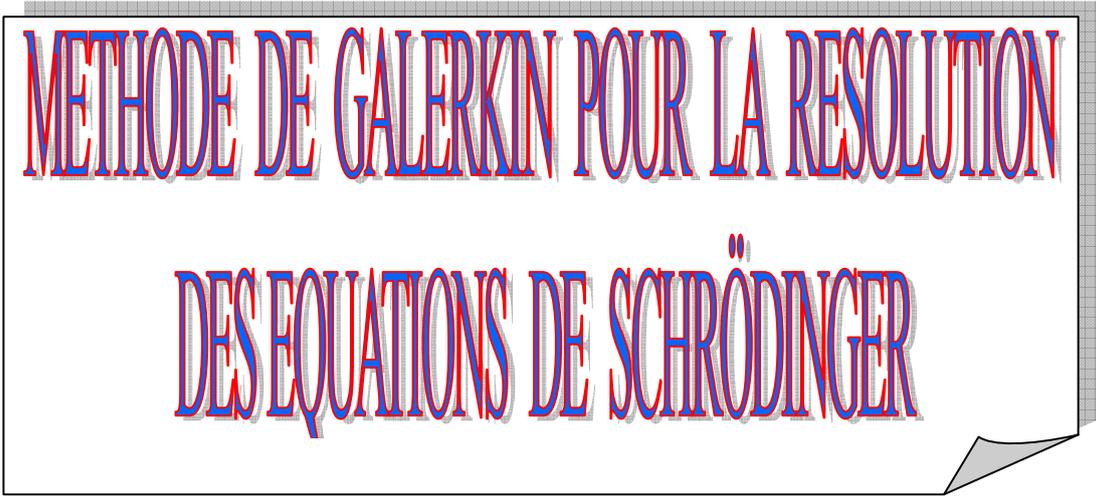
- [1] S. Mallat, Review of multifrequency channel decomposition of images and wavelet models; Technical Report, Num. 412, November 1988.
- [2] I. Daubechies, Orthonormal bases of compactly supported wavelets; Comm. Pure Appl. Math., Vol. 41, pp. 909-996, Nov. 1988.
- [3] S. Mallat, A Theory for Multiresolution Signal Decomposition : The Wavelet Rep- resentation; IEEE Trans. on PAMI, Vol. 11, No. 7, 1989.
- [4] D. Gabor, Theory of communication; J. Inst. Elec. Eng., Vol. 93(3), pp. 429-457, 1946.
- [5] P. Flandrin et N. Martin, Analyse Temps-frequence et Temps-echelle, Traitement du Signal et Images, Vol. 9, suppl. No. 1, 1992
- [6] Y. Meyer, Ondelettes et operateurs; Ed. Herman, 1990 .
- [7] M.Hussain; Thèse:Wavelets and Solution of Ordinary Differential,K. F. UNIVERSITY OF PETROLEUM;pp30-40;2005.
- [8] L. Baggett; P. Jorgensen; Arc; Math .Appl: A non-MRA Cr frame wavelet with rapid decay,; Secondary 46E25, 20C20;2000.
- [9] R. L.Rachel,Transformée en ondelettes: applications aux propriétés diélectriques et mécaniques de nanostructures carbonées,pp.130-143 ;2004.
- [10] B. Delyon ,Rap.Ceh ;Traitement du signal: Ondelettes orthogonales et Biorthogonales IRMAR, Université Rennes-I ;1993.
- [11] I. Alexandru, Math.Ter ; Cours: Théorie des ondelettes ; pp12-15 ;2002.

-
- [12] W. Jules, *Math. Appl : Ondelettes et applications en imagerie et en calcul de surfaces*, Lab-IMC; pp.10-30; Novembre 1993.
- [13] S. Mallat, *Multiresolution approximations and wavelet orthonormal bases of $L^2(\mathbb{R})$* , *Trans. Amer. Math. Soc.* 315, 69–87 (1989).
- [14] R. Glowinski, W.M. Lawton, M. Ravachol, E. Tenenbaum, *Wavelets solution of linear, nonlinear elliptic, parabolic and hyperbolic problems in one space dimension*, *Appl. Sci.and Eng*, SIAM, Philadelphia, PA, pp55-60,1992.
- [15] P. Gilles; *Math. Appl : Ondelettes generalisées et fonctions d'échelle à support compact* *Rev. Mat. IBE.* Vol. 9, N.° 2, 1993.
- [16] I. Daubechies. *Appl.Math: Ten lectures on wavelets.* Regional Conf. Series in61, ed. Society for Industrial & Mathematics, Philadelphia, 1992.
- [17] S. Goedecker. *Wavelets and their application – for the solution of partial differential equations in physics.* Presse. Pol.et U. Romande, Ed. Cahiers de Phsique 4, 1998.
- [18] I . Popovici : *matlab evaluation of the coefficients for pde solving by wavelet - galerkin approximation*, *Atc.Math; Univ. Ovidius Constanta* Vol. 18(1), 2010.
- [19] M.Q. Chen, C.H. Wang, Y.P. Shin : *The computation of wavelet-Galerkin approximation on a bounded interval*, *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 39 (1996) 2921–2944.
- [20] D. Georges : *A fast Method for the solution of some Tomography Problems*, *Decision and Control, CDC IEEE Conf.* (2008).

- [21] S. Dumont, and F. Lebon : Representation of plane elastostatics operators in Daubechies wavelets, *Comp. Structures* 60(4), 561-569 (1996).
- [22] X. Zhou : Connection coefficients on an interval and wavelet solutions of Burgers equation, *Jour . Applied Math.*135 ;63–78.2001.
- [23] A. Latto, H. L-Resnikoff: *The Evaluation of Connection Coefficients of Compactly Supported Wavelets*. Aware, Inc. Cambridge, 1999.
- [24] S.L. Ho, S.Y. Yang :Wavelet-Galerkin method for solving parabolic equations in finite domains;Elsevier .*Ele. Anl . Design* 37 . 1994
- [25] M.Q. Chen, C.H. Wang, Y.P. Shin : A Wavelet-Galerkin method for solving population balanced equations, *Comput. Chem. Eng.* 20 .131–145.1996.



Chapitre 3



METHODE DE GALERKIN POUR LA RESOLUTION
DES EQUATIONS DE SCHRÖDINGER



*Méthode de Galerkin pour la Résolution
des équations de Schrödinger*



*méthode de galerkin pour la résolution
des équations de schrödinger*

3.1. Introduction :

En physique classique, une particule est décrite par sa position $r(t)$. L'évolution de sa position (la trajectoire de la particule) est donnée par l'équation de Newton [1]

$$m \frac{\partial^2 r(t)}{\partial t^2} = F(r; t) \tag{3.1}$$

Ou

$F(r, t)$: la force extérieure (N).

$r(t)$: la position (m).

m : la masse de la particule(s).

En physique quantique, en vertu de la dualité onde-corpuscule, la particule est maintenant décrite par une fonction d'onde $\Psi(r;t)$ dont nous décrivons la signification et l'équation qui donne son évolution (l'équation de Schrödinger)[2]. Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles qui décrit l'évolution au cours du temps de la fonction d'onde d'un système physique, conçue par le physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1926 [3-5]. L'équation ne se démontre pas, sa validité se mesure par la confrontation entre les résultats théoriques, qu'elle engendre et les observations expérimentales.

3.2. Présentation de l'équation de Schrödinger :

On considère une particule libre de masse m , se déplaçant sur un axe (ox) et soumise à une force $\vec{F} = -grad V$; dérivant d'un potentiel $V(x)$

Ce système possède déjà quelques propriétés qui nous seront utiles pour établir l'équation de Schrödinger ; notamment la conservation de l'énergie [6]:

On établit très simplement que

$$E = E_c + E_p = \frac{p^2}{2m} + V(x) = cste \quad (3.2)$$

Ou

V : énergie potentielle.

E_c : énergie cinétique

Nous allons aussi nous appuyer sur deux relations quantiques :

$$E = \hbar\omega \quad (3.3)$$

Qui donne l'énergie d'un photon à la pulsation ω et $p = \hbar k$ qui donne l'impulsion p d'un photon de vecteur d'onde k . on généralisés ces relations quantiques à une particule en considérant qu'elle peut être décrite par une onde (c'est la grande idée du monde quantique). Cette onde sera caractérisée par une fonction d'onde $\Psi(x, t)$ éventuellement complexe et dont le module au carré caractérisera la probabilité de présence de la particule en un point [6].

Par analogie avec toutes les ondes étudiées en physique, nous poserons [5] :

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{-ikx - \omega t} \quad (3.4)$$

Nous calculons alors les dérivées de $\Psi(x, t)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = -k^2 \Psi(x, t) \\ \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -i\omega \Psi(x, t) \end{array} \right. \quad (3.5)$$

Or, d'après les deux relations quantiques que nous avons rappelés, cela équivaut aux égalités suivantes :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(x,t) \\ \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \Psi(x,t) \end{cases} \quad (3.6)$$

En multipliant la formule (3.2) par $\Psi(x, t)$ nous obtenons :

$$E\Psi(x, t) = \frac{p^2}{2m} \Psi(x, t) + V \Psi(x, t) \quad (3.7)$$

soit encore grâce aux relations sur les dérivées[7] :

$$i \hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V \Psi(x, t) \quad (3.8)$$

Ce que l'on peut écrire aussi sous la forme suivante [8]:

$$i \hbar \frac{\partial |\Psi(r;t)\rangle}{\partial t} = H |\Psi(r;t)\rangle \quad (3.9)$$

Où

- i est l'unité imaginaire ;
- \hbar est la constante de Planck réduite : $h/2\pi$.
- $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} |\Psi(t)\rangle + V(\hat{r}, t) |\Psi(t)\rangle$ est l'hamiltonien, dépendant du temps en général, l'observable correspondant à l'énergie totale du système
- \hat{r} est l'observable position ;
- \hat{p} est l'observable impulsion.

Lorsque l'opérateur H ne dépend pas du temps, on est ramené par séparation des variables spatiales et temporelle à une équation aux valeurs propres, appelée équation de Schrödinger stationnaire [9].

Par contre si l'hamiltonien est fonction du temps, on est obligé de résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps.

C'est le cas, par exemple, lorsqu'on traite certains problèmes de manière semi-classique [10, 11] ou quand on étudie l'effet sur un atome ou une molécule d'un champ électrique extérieur variable [12].

Pour une particule libre non relativiste[10] :

$$i \hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \quad (3.10)$$

Si le potentiel ne dépend pas explicitement du temps, alors la dépendance en temps de la fonction d'onde stationnaire étant en $e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$ on mettra donc les solutions sous formeséparable [13] et on peut séparer les variables et écrire :

$$\Psi(r, t) = \varphi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad (3.11)$$

$$\Rightarrow i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\varphi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left[\varphi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \right] + V \varphi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad (3.12)$$

$$\Rightarrow i \hbar \varphi(r) \left[-\frac{iE}{\hbar} e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [\varphi(r)] + V \varphi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad (3.13)$$

$$\Rightarrow -i^2 \hbar \left[\frac{E}{\hbar} \right] \varphi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [\varphi(r)] e^{-\frac{iE}{\hbar}t} + V \varphi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad (3.14)$$

$$\Rightarrow E \varphi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \varphi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} + V \varphi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad (3.15)$$

On aboutit alors à l'équation indépendante du temps [14] :

$$E \varphi(r) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V \right] \varphi(r) \quad (3.16)$$

Cette équation et l'équation d'onde dépendante du temps, de laquelle elle a été déduite, sont les deux équations de Schrödinger.

Par définition, la fonction d'onde doit dès lors vérifier la condition de normalisation pour tous les instants [13] :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^3r \Psi^* \cdot \Psi = 1 \quad (3.17)$$

Par définition, la donnée de cette fonction, à un instant donné, non seulement décrit toutes les propriétés du système à cet instant, mais encore détermine son comportement dans tous les états ultérieurs.

➤ **Définition I (État fondamental d'un système) :**

L'état fondamental d'un système est l'état de plus petite énergie [13]:

nous désignerons par la suite l'énergie de l'état fondamental par ε_0 . Dès lors, quelque soit l'état d'un système, la valeur moyenne de son énergie est supérieure ou égale à l'énergie propre de l'état fondamental :

$$\varepsilon[\Psi] \gg \varepsilon_0$$

Le spectre se sépare en deux parties : une partie discrète, et une partie continue.

3.3. Méthode de Galerkin pour résolution de l'équation de Schrödinger :

En général la méthode Galerkin consiste à procéder à une approximation d'une suite de sous espaces de dimension finie partant d'un problème posé dans un espace de dimension infinie [15].

D'une façon particulière, la méthode de Galerkin-ondelette basée sur l'utilisation des bases multi-résolutions de type ondelettes, consiste à projeter l'équation dans un espace multi-échelle, à représenter la solution, par ses coefficients d'échelle et d'ondelette. Ce n'est qu'en fin de calculs qu'on recompose cette solution à partir de ces coefficients qui sont des solutions de l'équation projetée dans leur espace.

Le traitement des termes produit, dérivées etc.....fait apparaître des coefficients appelés coefficients de connexion qui relient les coefficients des différents termes aux coefficients de la solution.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger on choisit par exemple la base $|\vec{r}\rangle$ correspondant à la représentation de position définie par [14] :

$$\hat{r}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle \quad (3.18)$$

alors la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t) \equiv \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle$ satisfait à l'équation suivante :

$$\frac{-\hbar}{2m} \nabla^2 \varphi(r) + V(r) \varphi(r) = E \varphi(r) \quad (3.19)$$

On écrit donc :

$$\frac{-\hbar}{2m} \left[\frac{\partial^2 \varphi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi(x, y, z)}{\partial z^2} \right] + V(x, y, z) \varphi(x, y, z) = E \varphi(x, y, z) \quad (3.20)$$

A un dimension, l'équation de Schrödinger équivaut [16] :

$$\frac{-\hbar}{2m} \left[\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} \right] + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (3.21)$$

Pour simplification le calcul $\frac{\hbar}{2m} \equiv 1$

La transformée en ondelettes d'une fonction $\varphi(x)$ continue comme une décomposition en fonction de base de ondelette $\psi_{(a,b)}$, doit être choisi parmi les considération physiques'écrit [17] :

$$\varphi(x) = \frac{1}{c_v} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{a}} \psi\left(\frac{x-a}{b}\right) \langle \psi_{(a,b)} | \varphi \rangle \frac{da db}{a^2} \quad (3.22)$$

Pour toute valeur positive de l'énergie ε , ce système admet des solutions qui sont des ondes planes on poserons :

$$\varphi(x) = u(x) e^{ikx} \quad (3.23)$$

Avec :

\mathbf{k} vecteur d'onde de module .

Injectons l'expression de $\varphi(x)$ dans 3.16 on aura :

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial}{\partial x} (u(x) e^{ikx}) \right] + V(x) (u(x) e^{ikx}) = E u(x) e^{ikx} \quad (3.24)$$

La dérivée première de équation (3.23) donnée par :

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(u(x) e^{ikx} \right) \right] = \frac{\partial u(x)}{\partial x} e^{ikx} + ik u(x) e^{ikx} \quad (3.25)$$

Et nous pouvons obtenir la dérivée seconde 3.23 :

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial u(x)}{\partial x} e^{ikx} + ik u(x) e^{ikx} \right] = \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} e^{ikx} + ik \frac{\partial u(x)}{\partial x} e^{ikx} + ik \frac{\partial u(x)}{\partial x} e^{ikx} - k^2 u(x) e^{ikx} \quad (3.26)$$

Nous trouver :

$$\Rightarrow -\frac{\partial}{\partial x} \left[u'(x) e^{ikx} + ik u(x) e^{ikx} \right] + V(x) \left(u(x) e^{ikx} \right) = E u(x) e^{ikx} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow & - \left[u''(x) e^{ikx} + ik u'(x) e^{ikx} + ik u'(x) e^{ikx} - k^2 u(x) e^{ikx} \right] \\ & + V(x) u(x) e^{ikx} = E u(x) e^{ikx} \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\Rightarrow - \left[u''(x) + 2iku'(x) - k^2 u(x) \right] + V(x) u(x) = E u(x) \quad (3.29)$$

Nous obtenons l'équation suivante :

$$u''(x) + 2iku'(x) - V(x)u(x) = (k^2 - E)u(x) \quad (3.30)$$

Cette équation différentielle partielle est souvent résolue en utilisant la méthode ondelettes-Galerkin sur une base de Daubechies.

On cherche la solution dans l'espace V_j d'une AMR orthogonale de $L^2(T)$ sur l'intervalle $T = [0, 1]$, orthonormées dans $L^2(T)$, ainsi que sur des dilatations de ce dernier.

En introduisant tous les niveaux de résolution, j , on développe suivant une série d'ondelettes, sur l'intervalle $x \in [0, 1]$, la fonction considérée [18-21]:

$$u_j(x) = \sum_n C_n \phi_{jn}(x) \quad (3.31)$$

Avec : C_n coefficient inconnu, à déterminer ; $n \in \mathbf{Z}$.

Où, suivant une transformation dyadique, on écrira :

$$\phi_{jn}(x) = 2^{j/2} \phi(2^j x - n) \quad (3.32)$$

Avec :

$$-(L-1) \leq n \leq 2^j - 1 + (L-1) \quad (3.33)$$

Le paramètre L représente l'ordre du filtre de l'ondelette de Daubechies, autrement dit le nombre de coefficients du filtre.

De même l'expansion ondelettes pour $V(x)$ est :

$$V_j(x) = \sum_l g_l \phi_{jl}(x) \quad (3.34)$$

Avec :

$$-(L-1) \leq l \leq 2^j - 1 + (L-1)$$

En injectant 3.16 dans l'équation 3.15 nous obtenons :

$$\begin{aligned} \sum_n C_n \frac{\partial^2 \phi_{jn}(x)}{\partial x^2} + 2ik \sum_n C_n \frac{\partial \phi_{jn}(x)}{\partial x} \\ - \sum_n C_n \sum_l g_l \phi_{jl}(x) \phi_{jn}(x) = (k^2 - E) \sum_n C_n \phi_{jn}(x) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Pour déterminer les coefficients dans C_n , nous prenons le produit scalaire des deux côtés de l'équation. (3.35) avec $\phi_{jn'}(x)$:

$$\begin{aligned} \sum_n C_n \int_0^1 \phi_{jn}''(x) \phi_{jn'}(x) dx + \gamma \sum_n C_n \int_0^1 \phi_{jn}'(x) \phi_{jn'}(x) dx \\ - \sum_n C_n \sum_l g_l \int_0^1 \phi_{jl}(x) \phi_{jn}(x) \phi_{jn'}(x) dx = (k^2 - E) \sum_n C_n \int_0^1 \phi_{jn}(x) \phi_{jn'}(x) dx \end{aligned} \quad (3.36)$$

Avec :

$$-(L-1) \leq n' \leq 2^j - 1 + (L-1), \gamma = 2ik \quad (3.37)$$

Utilisation des propriétés d'une base orthogonale:

$$\langle \phi_{j,n} | \phi_{j,n'} \rangle = \delta_{n,n'}$$

Donc on aura :

$$\sum_n C_n a_{nn}^j + \gamma \sum_n C_n b_{nn}^j - \sum_n C_n \sum_l g_l d_{ln}^j = (k^2 - E) \sum_n C_n \delta_{n,n} \quad (3.38)$$

Posons :

$$a_{nn}^j = \int_0^1 \phi_{jn}''(x) \phi_{jn'}(x) dx \quad (3.39)$$

$$b_{nn}^j = \int_0^1 \phi_{jn}'(x) \phi_{jn'}(x) dx \quad (3.40)$$

$$d_{lnn}^j = \int_0^1 \phi_{jl}(x) \phi_{jn}(x) \phi_{jn'}(x) dx \quad (3.41)$$

Après transformée de l'équation (3.38) sous forme de matrice, on démontre que :

$$\left[F_1 + \gamma F_2 + \sum_l g_l F_3 \right] U = (k^2 - E) U \Rightarrow AU = (k^2 - E)U \quad (3.42)$$

$$F_1 = \left[a_{nn}^j \right]_{-(L-1) \leq n, n' \leq 2^j - 1 + (L-1)} \quad (3.43)$$

$$F_3 = \left[d_{lnn}^j \right]_{-(L-1) \leq n, l, n' \leq 2^j - 1 + (L-1)} \quad (3.44)$$

$$F_2 = \left[b_{nn}^j \right]_{-(L-1) \leq n, n' \leq 2^j - 1 + (L-1)} \quad (3.45)$$

$$U = \left[c_{-(L-1)}, c_{-(L-2)}, \dots, c_{2^j - 1 + (L-1)} \right]^T \quad (3.46)$$

Pour déterminer les valeurs des coefficients, sur l'intervalle $x \in [0, 1]$ nous pouvons utiliser l'algorithme de M. Q. Chen [19] ou l'algorithme de A. Latto [22].

Sachant que :

$$\begin{cases} \phi_{jn}(x) = 2^{j/2} \phi(2^j x - n) \\ \phi_{jn'}(x) = 2^{j/2} \phi(2^j x - n') \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \phi_{jn}'(x) = 2^{3j/2} \phi'(2^j x - n) \\ \phi_{jn}''(x) = 2^{5j/2} \phi''(2^j x - n) \end{cases} \quad (3.47)$$

En l'injectant dans les coefficients a_{nn}^j ; b_{nn}^j , d_{lnn}^j , on aura :

$$\begin{aligned}
a_{nn'}^j &= \int_0^1 2^{5j/2} \phi''(2^j x - n) [2^{j/2} \phi(2^j x - n')] dx \\
&= 2^{3j} \int_0^1 \phi^{(0)}(2^j x - n') \phi^{(2)}(2^j x - n) dx \\
&= 2^{3j} \int_0^1 \phi_{n'}^{(0)}(x) \phi_n^{(2)}(x) dx
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Utilisation des propriétés des coefficients de connexion, H. L. Resnikoff et al. [23] :

$$\begin{aligned}
a_{nn'}^j &= 2^{3j} \int_0^1 \phi^{(0)}(x) \phi_{n-n'}^{(2)}(x) dx \\
&= 2^{3j} \Omega_{n-n'}^{02}
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Peuvent également profiter de lemme III :

$$\begin{aligned}
\int_0^1 \phi^{(2)}(2^j x - n) \phi^{(0)}(2^j x - n') dx &= - \int_0^1 \phi^{(1)}(2^j x - n) \phi^{(1)}(2^j x - n') dx \\
\Rightarrow \Omega_{n-n'}^{02} &= -\Omega_{n-n'}^{11} .
\end{aligned} \tag{3.50}$$

et les coefficients $b_{nn'}^j$:

$$\begin{aligned}
b_{nn'}^j &= 2^{2j} \int_0^1 \phi^{(1)}(2^j x - n) \phi^{(0)}(2^j x - n') dx \\
&= 2^{2j} \int_0^1 \phi_{n'}^{(0)}(x) \phi_n^{(1)}(x) dx \\
&= 2^{2j} \int_0^1 \phi^{(0)}(x) \phi_{n-n'}^{(1)}(x) dx \\
&= 2^{2j} \Omega_{n-n'}^{01}
\end{aligned} \tag{3.51}$$

et les coefficients $d_{lnn'}^j$:

$$\begin{aligned}
d_{lnn'}^j &= \int_0^1 \phi_{jl}(x) \phi_{jn}(x) \phi_{jn'}(x) dx \\
&= \int_0^1 \phi^{(0)}(2^j x - l) \phi^{(0)}(2^j x - n) \phi^{(0)}(2^j x - n') dx \\
d_{lnn'}^j &= \int_0^1 \phi_l^{(0)}(x) \phi_n^{(0)}(x) \phi_n^{(0)}(x) dx
\end{aligned} \tag{3.52}$$

Utilisation des propriétés des coefficients de connexion, H. L. Resnikoff et al. [23] :

$$d_{lnn'}^j = \int_0^1 \phi^{(0)}(x) \phi_{n-l}^{(0)}(x) \phi_{n'-l}^{(0)}(x) dx = \delta_{n-l, n'-l} \quad (3.53)$$

qui est 1 uniquement lorsque $n = n' = l$ et 0 sinon.

Donc on aura :

$$2^{3j} \sum_n C_n \Omega_{n-\hat{n}}^{02} + \gamma 2^{2j} \sum_n C_n \Omega_{n-\hat{n}}^{01} - \sum_n C_n \sum_l g_n \delta_{n-l, n'-l} = (k^2 - E) C_n \quad (3.54)$$

Pour calculer $\Omega_{n-\hat{n}}^{02}$, $\Omega_{n-\hat{n}}^{01}$, les algorithmes de calculs sont donnés précédemment.

Maintenant, d'une façon similaire. Ainsi, les équations aux limites qui en résultent sont:

$$\begin{aligned} \sum_n C_n \phi_{jn}(0) = \alpha &\Rightarrow \int_0^1 \sum_n C_n \phi_{j\hat{n}}(0) \phi_{jn}(0) dx = \alpha \\ &\Rightarrow \sum_n C_n \int_0^1 \phi_{j\hat{n}}(0) \phi_{jn}(0) dx = \alpha \\ &\Rightarrow \sum_n C_n \delta_{n,\hat{n}}(0) = \alpha \end{aligned} \quad (3.55)$$

$$\begin{aligned} \sum_n C_n \phi_{jn}(1) = \beta &\Rightarrow \int_0^1 \sum_n C_n \phi_{j\hat{n}}(1) \phi_{jn}(1) dx = \beta \\ &\Rightarrow \sum_n C_n \int_0^1 \phi_{j\hat{n}}(1) \phi_{jn}(1) dx = \beta \\ &\Rightarrow \sum_n C_n \delta_{n,\hat{n}}(1) = \beta \end{aligned} \quad (3.56)$$

développe suivant une série de $V(x)$ L'équation (3.34) peut alors être écrite comme. [24] :

$$V_j = \sum_l g_l \phi_{j-l} = \sum_l g_{j-l} \phi_l \quad (3.57)$$

La représentation matricielle est :

$$V = K_\phi * g$$

avec $\phi_l = \phi(l)$, K_ϕ : est le produit de convolution kernel

c'est à dire lepremière colonne de la matrice de fonction d'échelle.

nous obtenons la forme matricielle suivante:

$$\begin{bmatrix} V_{-L+1} \\ V_{-L+2} \\ V_{-L+3} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ V_{L-1+2^j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \phi_{L-2} & \dots & \phi_3 & \phi_2 & \phi_1 \\ \phi_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & \dots & \dots & \phi_3 & \phi_2 \\ \phi_2 & \phi_1 & 0 & \dots & \dots & 0 & \dots & \dots & \phi_4 & \phi_3 \\ \dots & \dots \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ \phi_{L-2} & \phi_{L-3} & \phi_{L-1} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{L-2} & \phi_{L-3} & \phi_{L-1} & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{L-2} & \phi_{L-3} & \phi_{L-1} & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \phi_{L-3} & \dots & \phi_2 & \phi_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{-L+1} \\ g_{-L+2} \\ g_{-L+3} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ g_{L-1+2^j} \end{bmatrix} \quad (3.58)$$

Après discretion mer maintenant structure the systemde la matrice

$A = \left\{ F_1 + \gamma F_2 + \sum_i g_i F_3 \right\}$ est la formesuivante:

$$F_1 = 2^{3j} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \Omega_1^{02} & \Omega_0^{02} & \Omega_{-1}^{02} & \dots & \dots & \Omega_{2-L}^{02} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Omega_2^{02} & \Omega_1^{02} & \Omega_0^{02} & \Omega_{-1}^{02} & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \Omega_{2-L}^{02} & \dots & \dots & \dots & \Omega_{-1}^{02} & \Omega_0^{02} & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \Omega_0^{02} & \Omega_1^{02} & \Omega_2^{02} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \Omega_{2-L}^{02} & \dots & \Omega_{-1}^{02} & \Omega_0^{02} & \Omega_1^{02} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.59)$$

$$\gamma F_2 = \gamma 2^{2j} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \Omega_1^{01} & \Omega_0^{01} & \Omega_{-1}^{01} & \dots & \dots & \Omega_{2-L}^{01} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Omega_2^{01} & \Omega_1^{01} & \Omega_0^{01} & \Omega_{-1}^{01} & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \Omega_{2-L}^{01} & \dots & \dots & \dots & \Omega_{-1}^{01} & \Omega_0^{01} & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \Omega_0^{01} & \Omega_1^{01} & \Omega_2^{01} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \Omega_{2-L}^{01} & \dots & \Omega_{-1}^{01} & \Omega_0^{01} & \Omega_1^{01} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.60)$$

$$\sum_l g_l F_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{-L+1} \\ g_{-L+2} \\ g_{-L+3} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ g_{L-1+2^j} \end{bmatrix} \quad (3.61)$$

Les différents étapes de calcul que nous avons arrêté et qui permettent d’effectuer la résolution de notre équation sont les suivantes :

1. Détermination du support du filtre de Daubechies.
2. Détermination des coefficients de connections.
3. Détermination des coefficients de décomposition, en ondelettes, du potentiel.
4. Calcul de l’énergie à partir de la fonction obtenue par l’équation (3.54).

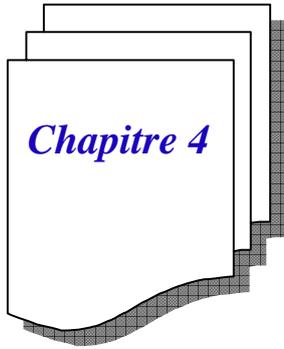
Pour résoudre le système nous avons, aussi, utilisé les deux équations aux limites cuitées ci-dessus.

Ainsi nous avons cité toutes les étapes conduisant à la construction de la fonction d'onde .

Références

- [1] P. Amiot, L. Marleau; Mécanique Classique II, U.Laval, 2006.
- [2] L. Landau and E. Lifchitz: Mécanique quantique ; EMIR, Moscou, 1966.
- [3] H. Chebli, Analyse Hilbertienne, pp.165-160 ; Pub UVT; 2001.
- [4] P. William Atkins, M. Mottet. and Paul Depovere : Éléments de chimie physique. P P. 296-300;1998.
- [5] W. Greiner;B. Müller, Mécanique quantique : Symétries; pub. Verlag Harri Deutsch, pp.23-26, 1999.
- [6] Y. Mohammed, Thèse : Theories des ondelletes et les équation de Transport ;pp .66-70 ;U.Tlemcen ;2009.
- [7] C. Aslangul, Mécanique quantique 2: Développements et applications à basse énergie ;pp.706-720 ; De Boeck Université ; 2008.
- [8] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë : Mécanique quantique, Hermann ; 1997.
- [9] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique, Hermann, Paris, 1973.
- [10] N. Yamanaka, Y. Kino, Phys. Rev. A, 64, 042715 ,2001.
- [11] V.S. Melezhik, D. Baye, Phys. Rev. C, 59, 3232 ,1999.
- [12] D. Dundas, Phys. Rev. A, 65, 023408 ,2002.
- [13] C. Chauvin, Thèse : Les ondelettes comme fonctions de base dans le calcul de structures électroniques ;INS.POL. GRE,pp.21-30 ; 2005.
- [14] Minh Quang; Physique générale IV : La fonction d'onde et l'équation de Schroedinger ; E.P.F.1 ;pp.3-7 ; 2009.

- [15] G. Goldstein, Thèse : Techniques de résolution numérique de l'équation de Schrödinger dépendant du temps; Université Libre de Bruxelles; pp.6-10,2003.
- [16] M.V. Altaisky; Wavelets: Theory Applications, Implementation, Universities Press; pp.124-126;2005.
- [17] M.V. Altaisky, Art; Phy. Ther: Wavelet basis for the Schrödinger equation; Cen.Appl. Math, B.M.Birla Science Centre, 500463, India;1995.
- [18] M. El-Gamel : A Wavelet-Galerkin method for a singularly perturbed convection-dominated diffusion equation , Math.Appl; Mansoura University, Egypt ; pp.1635–1644,2006.
- [19] A. Avudainayagam, Wavelet-Galerkin method for integro-differential equations, Appl. Numer. Math. 32 (2000), pp. 247–254.
- [20] S.H. Behiry, J.R. Cannon and H. Hashish: Comparison of a Wavelet-Galerkin Procedure With a Crank-Nicolson-Galerkin Procedure for the Diffusion; DePaul University ; Int. J. Numer ; Chicago, IL 60614, 2002.
- [21] K. Amaratunga and J. R. Williams, Wavelet-Galerkin solution for one-dimensional partial differential equations, Int. J. Numer. Methods Eng, 37, 2703-2716, 1994.
- [22] A. Latto, H. L-Resnikoff : The Evaluation of ConnectionCoefficients of Compactly Supported Wavelets. Aware, Inc. Cambridge, 1999.
- [23] H. L. Resnikoff and R. O. J. Wells : Wavelet Analysis, The Scalable Structure of Information, New-York ,Springer, 1998.
- [24] K. Amaratunga, J. R. Williams, S.Qian: Wavelet-Galerkin solutions for one dimensional partial differential equations, 1992.





4

Résultats des Applications

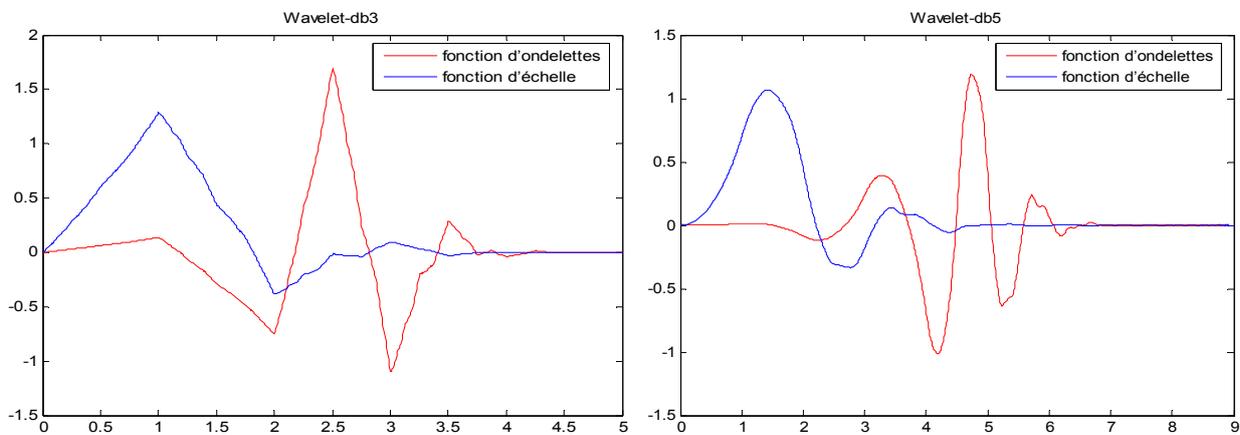
4.1. Résultats numériques:

Dans ce travail, nous allons utiliser la méthode de Galerkin-ondelette et les propriétés d'analyse multi-échelles dans ces processus, en se servant de l'ondelette .

4.1.1. Coefficients de connexion:

En 1988 Daubechies [1-4] introduit une classe de base d'ondelette à support compact (compactly supported). Cette famille d'ondelette contient des membres gouvernés par un ensemble de coefficients $\{p_k : k = 0,1 \dots, L - 1\}$. Où l'ordre de l'ondelette $L = 2N$.

Actuellement, ϕ et ψ sont disponibles dans des versions avancées de MATLAB7.10, ces fonctions sont disponibles pour $1 \leq N \leq 45$. Les graphes de ϕ et ψ pour $N = 3$ et $N = 5$ sont tracés dans la figure. 4.1.



le tableau-4.1 sont donnés les solutions de P_k pour $N=3,4$ qui satisfont 2.9-2.10, peuvent être trouvées dans Daubechies [2].

La même chose pour des valeurs plus élevées de N . Elles sont disponibles dans la boîte à outils de MATLAB.

k	P_k		
	$db3$	$db4$	$db5$
0	0.4704672077841	0.3258034280512	0.225744381143611989
1	1.1411169158314	1.0109457150918	0.851399270414037477
2	0.6503650005262	0.8922001382467	1.021275025097259789
3	-0.1909344155568	-0.0395750262356	0.195183685720862187
4	-0.120832208310	-0.2645071673690	-0.341635790763598622
5	0.0498174997316	0.04361630047417	-0.045465266114340101
6	-	0.04650360107098	0.1093758063144644511
7	-	-0.01498698933036	-0.570534620351890226
8	-	-	-0.017738860318705623
9	-	-	0.0047033726525180171

Table -4.1 : Support du filtre de Daubechies pour les ordres $L=6,8, 10$ [5,7].

4.1.2. Coefficients de 2-termes :

Afin de procéder à la résolution de notre problème, nous devons calculer, au préalable, les coefficients à deux termes, et ceci en utilisant les algorithmes décrits dans les sections 2.3.4.

Les exemples sont donnés pour les ondelettes de Daubechies d'ordre $L=6$ ($db3$).

Un code Fortran, écrit par Restrepo et al. [6], existe permet de calculer les coefficients de connexion de 2-termes en ondelettes périodiques. Il est basé sur Latto et al. [7] et a été utilisé Matlab dans ce travail:

$$\begin{bmatrix}
 \mathbf{T}_{1;1} - \mathbf{C} & \mathbf{T}_{1;2} & \mathbf{T}_{1;3} & \mathbf{T}_{1;4} & \mathbf{T}_{1;5} & \mathbf{T}_{1;6} & \mathbf{T}_{1;7} & \mathbf{T}_{1;8} & \mathbf{T}_{1;9} \\
 \mathbf{T}_{2;1} & \mathbf{T}_{2;2} - \mathbf{C} & \cdot \\
 \mathbf{T}_{3;1} & \cdot & \mathbf{T}_{3;3} - \mathbf{C} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{T}_{2;9} \\
 \mathbf{T}_{4;1} & \cdot & \cdot & \mathbf{T}_{4;4} - \mathbf{C} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{T}_{3;9} \\
 \mathbf{T}_{5;1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{T}_{5;5} - \mathbf{C} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \mathbf{T}_{6;1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{T}_{6;6} - \mathbf{C} & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \mathbf{T}_{7;1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{T}_{7;7} - \mathbf{C} & \cdot & \cdot \\
 \mathbf{T}_{8;1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{T}_{8;8} - \mathbf{C} & \cdot \\
 \mathbf{T}_{9;1} & \mathbf{T}_{9;2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{T}_{9;8} & \mathbf{T}_{9;9} - \mathbf{C} \\
 \mathbf{M}_1^d & \mathbf{M}_2^d & \mathbf{M}_3^d & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \mathbf{M}_9^d
 \end{bmatrix}$$

Les résultats numériques pour les coefficients sont donnés dans le tableau suivant :

l	Ω_l^{02}	l	Ω_l^{02}
-4	+5.3571428571412E-003	1	+3.3904761904762E+000
-3	+0.11428571428572E+000	2	-0.87619047619048E+000
-2	-0.87619047619048E+000	3	+0.11428571428571E+000
-1	+3.3904761904762E+000	4	+5.3571428571430E-003
0	-5.2678571428572E+000		

Table -4.2 : Les valeurs de coefficients Ω_l^{02} pour Daubechies $L=6, j=2$.

l	Ω_l^{02}	l	Ω_l^{02}
-4	1.305428247833931E-027	1	1.330798431515465E-025
-3	4.883528243220397E-028	2	-4.687792598325600E-026
-2	1.266935147346507E-026	3	3.869846240599264E-027
-1	0	4	-7.840890918981166E-028
0	-1.033936574732684E-025		

Table -4.3 : Les valeurs de coefficient Ω_l^{02} pour Daubechies $L=6, j=5$.

l	Ω_l^{01}	l	Ω_l^{01}
-4	-3.4246575342471E-004	1	+0.74520547945206E+000
-3	-1.4611872146119E-002	2	-0.14520547945205E+000
-2	+0.14520547945205E+000	3	+1.4611872146119E-002
1	-0.74520547945205E+000	4	+3.4246575342476E-004
0	-3.2049276679778 E-015		

Table -4.4: Les valeurs de coefficients Ω_l^{01} pour Daubechies $L=6, j=2$.

l	Ω_l^{01}	l	Ω_l^{01}
-4	2.244383561643489E+001	1	-4.883778630136992E+004
-3	9.576036529680322E+002	2	9.516186301369848E+003
-2	-9.516186301369849E+003	3	-9.576036529680456E+002
1	4.883778630136971E+004	4	-2.244383561644446E+001
0	2.288421809768143E-010		

Table -4.5: Les valeurs de coefficients Ω_l^{01} pour Daubechies $L=6, j=4$.

l	$db3$	$db4$	$db5$
0	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00
1	0.128633551E+01	0.10071700E+01	0.69613606E+00
2	-0.385836960E-01	-0.33836954E-01	0.44905760E+00
3	0.952675460E-02	0.396104630E-01	-0.18225401E+00
4	0.423434560E-03	-0.11764368E-01	0.37231823E-01
5	0.000000000E+00	-0.11979576E-02	0.15175751E-02
6	-	0.18829413E-04	-0.17267962E-02
7	-	0.00000000E+00	0.37569471E-04
8	-	-	0.17413312E-06
9	-	-	0.00000000E+00

Table -4.6: Les valeurs de fonction d'échelle ϕ_l pour Daubechies $L=6, 8, 10$.

➤ Soit l'exemple ci-dessous de la fonction de Hölder, d'exposant $\frac{1}{2}$:

($v(x) = \sqrt{|\cos(2\pi x)|}$). Nous montrons comment on peut visualiser les coefficients de décomposition sur une base d'ondelettes de Daubechies.

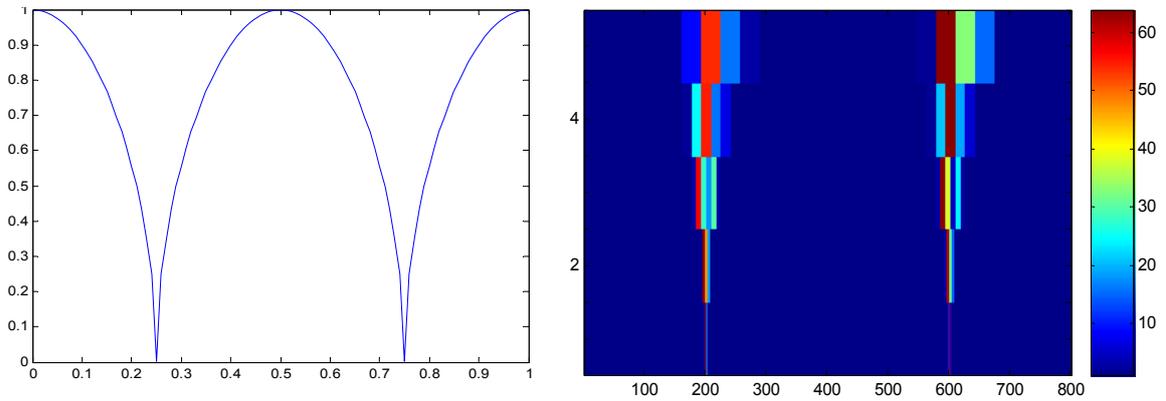


Fig.4.2 : la fonction a analyser et sa absolue des coefficients transformée discrètes en ondelettes Daubechies $L=8$, (abscisse : $[0, 1]$).

4.2 Marches de Potentiel:

Soit la barrière de potentiel carré suivante :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ v_0 & x \geq 0 \end{cases}$$

On considère une particule de masse m , venant de $-\infty$; dans un état stationnaire d'énergie $E < V_0$; (figure.4.3).

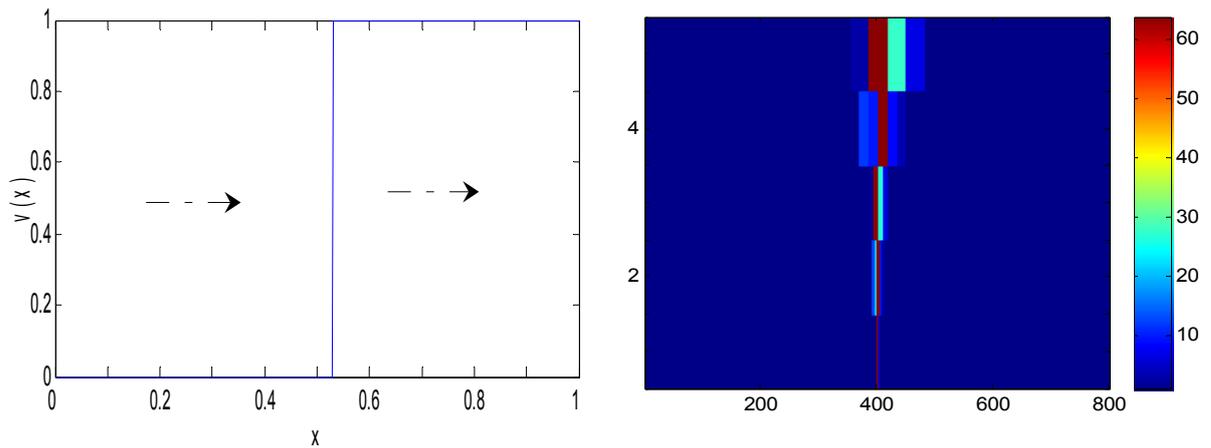


Fig.4.3: marches potentiel carré avec $v_0=1$, et sa absolue coefficients transformée discrètes en ondelettes Daubechies $L=8$, (abscisse : $[0, 1]$).

Le tableau - 4.7 donne les résultats calculés d' coefficients du système :

g_l		
$1.919500E-04$	$1.023000E+00$	$1.000000E+00$
$2.253100E-05$	$1.006800E+00$	$1.000000E+00$
$-9.061400E-06$	$1.000300E+00$	$1.000000E+00$
$-5.018500E-06$	$9.995100E-01$	$2.226000E-01$
$-9.083800E-07$	$9.998102E-01$	$-1.058500E-02$
$1.290400E-07$	$9.999801E-01$	$-2.295300E-02$
$1.225000E-07$	$1.000000E+00$	$-6.833400E-03$
$7.774000E-01$	$1.000000E+00$	$-3.149600E-04$
$1.010600E+00$	$1.000000E+00$	$4.871800E-04$

Table -4.7: Les valeurs de coefficients g_l pour Daubechies $L=6$, $j=4$.

En se servant de l'étude précédente et en utilisant l'algorithme du chapitre 3 et les résultats numériques des coefficients traités par diverses choix par le matlab on peut construire les Tables 4.7 donne les résultats calculés d'énergie E du système , pour ondelettes Daubechies $L=6$, les solutions sont comparées aux solutions exactes :

n résultat	E (analytique)	E (ondelettes) ($j=2$)	E (ondelettes) ($j=3$)	E (ondelettes) ($j=4$)
1	0.01807228	0,01845528	0,01813228	0,01807885
2	0.07223093	0,07261328	0,07228811	0,07223732
3	0.16228643	0,16267941	0,16232150	0,16229875
4	0.28786206	0,28743201	0,28788741	0,28786347
5	0.44824721	0,44786152	0,44819875	0,44824067
6	0.64195558	0,64157107	0,64192683	0,64195721
7	0.86462081	0,86221401	0,86556327	0,86462460

Table -4.8: Les résultats calculés de l'énergie E du système pour $D6$, $j=2,3,4$.

Les problèmes sont résolus en ϕ utilisant des fonctions d'échelle D6, 8, 10 successivement à la résolution niveaux j entre 2 et 8, l'erreur est définie comme suit :

$$|erreur| = \left| \frac{U_{ond} - U_{ext}}{U_{ext}} \right|$$

Le figure 4.4 ci-dessous donne des valeurs numériques calculés de l'erreur d'énergie E du système , pour ondelettes Daubechies $L=6,4,5$, et niveau de la résolution j entre 2 et 8.

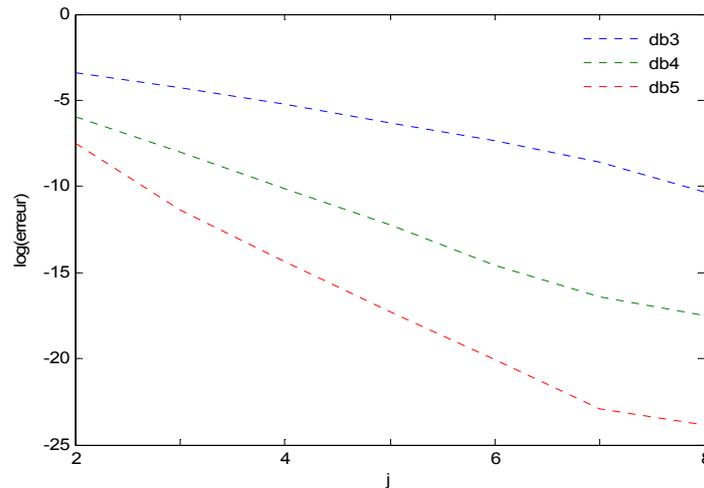


Fig.4.4 .l'erreur en fonction de la résolution j , pour D6, 8, 10.

On utilisant D6,D8 et resolution $j=4$, les résultats numériques la fonction d'onde sont présentés sur les figures ci-dessous. (Figure 4.5, 4.6) :

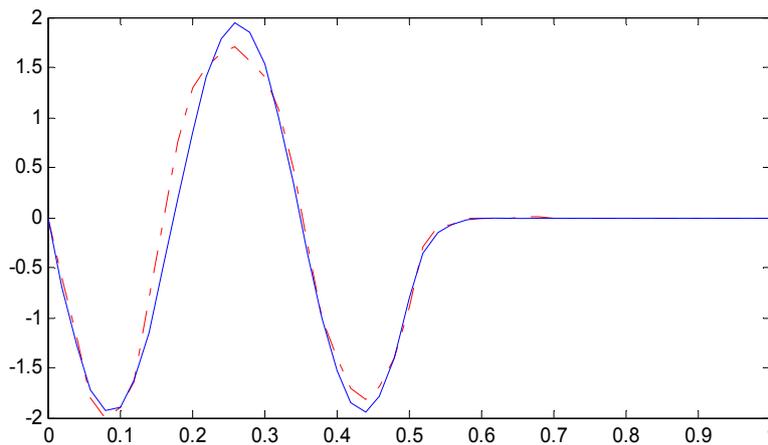


Fig.4.5 : la fonction d'onde du système $E(n=3)$,D6 ; $j=4$.

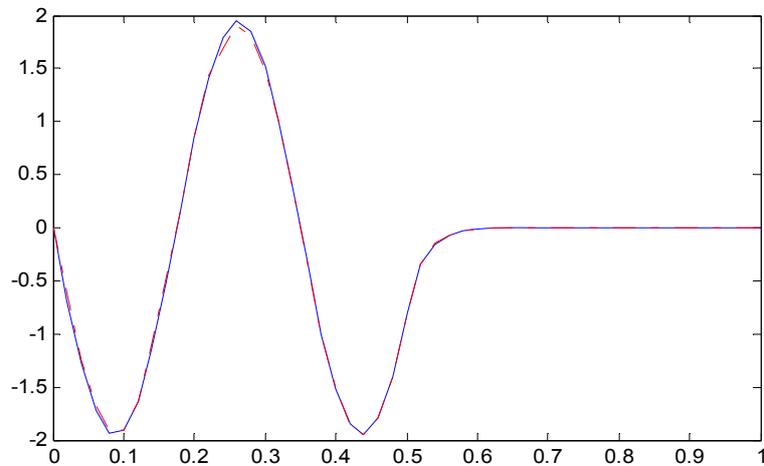


Fig.4.6 : la fonction d'onde du système $E(n=3)$, $D8$; $j=4$.

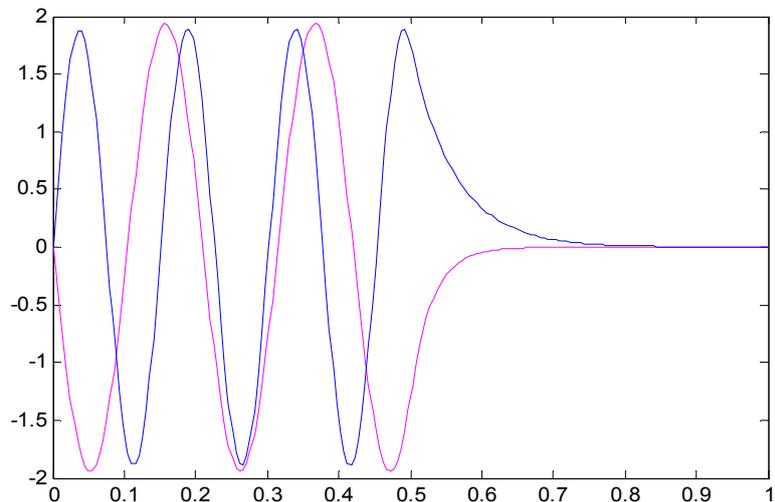


Fig.4.6 : la fonction d'onde du système $E(n=5,7)$, $D10$; $j=8$.

➤ **Discussions :**

Après l'obtention des coefficients de connexions et en suivant l'algorithme obtenue dans le chapitre ,dans ce modele en utilisant daubichies $L= 6$ et niveau de la resolution j entre 2 et 8. les résultats de l'énergie pour différents vecteur d'onde k sont comparées avec celles théoriques données dans le tableau 4.8 ,la figure 4.4 donne l'erreurs de l'énergie en fonction de la niveau resolution j pourtrois diffirentes ordre d'daubechies, et celui de la foction d'onde pour la marche de potentiel (fig 4.3) definie dans la figure .4.5,4.6 en utilisant daubichies $L=6,8$ et niveau de la resolution $j=4$. En comparant les résultats

numeriques d'énergie E et la fonction d'onde du système $E(n=3,5,7)$ obtenus avec celles théoriques on trouve des légers erreurs, On traite les différents résultats de l'énergie du système, on peut étudier la variation des erreurs la figure 4.4 montre la variation des erreurs en fonction de l'ordre daubechie 3,4,5 (D6, D8, D10) avec la niveau resolution j est varié, On trouve que l'erreur diminue en élevant l'ordre de daubechies et en élevant la resolution j , donc pour meilleure précision on choisit l'ordre daubechie avec une niveau resolution plus élevée.

4.3 Modèle de Kronig-Penney :

On étudie dans ce cas un modèle de Kronig-Penney ; l'exemple à un réseau unidimensionnel de puits de potentiel Carrés suivante, figure .4.7 :

$$V = \begin{cases} 0 & na < x \leq (n + 1)a \\ -v_0 & na < x \leq na \end{cases} \quad V_0 > 0; n \in \mathbf{Z}.$$

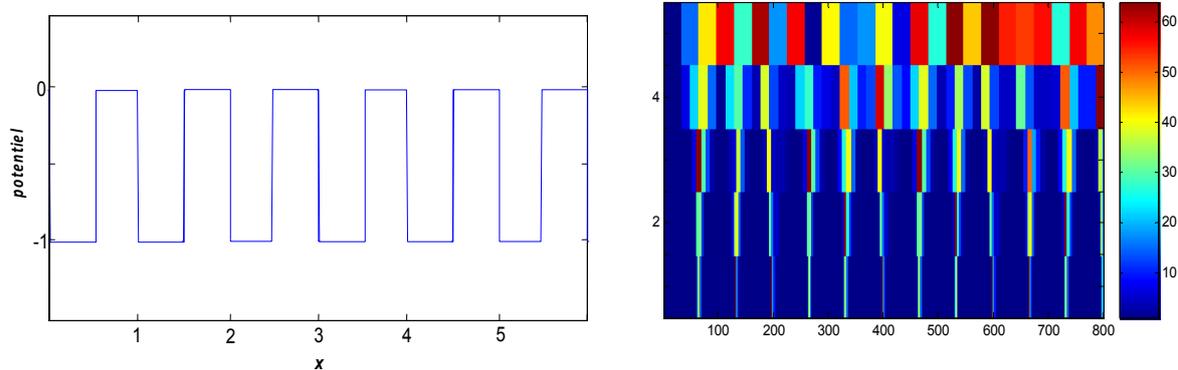


Fig .4.7. potentiel périodique de réseau unidimensionnel et sa absolue coefficients transformée discrètes en ondelettes Daubechies $L=8$, (abscisse : $[0, 1]$).

On néglige toute répulsion coulombienne entre électrons et on utilise pour ce problème des conditions aux limites périodiques qui sont habituelles en physique du solide.

Nous cherchons les états liés ($E < 0$) du système, l'algorithme utilisé pour l'expliquer est programmé sous logiciel Matlab.

L'équation est résolue pour l'étape périodique potentielle voir Figure .4.7, Pour à l'aide de Daubechies $L=8, 10$ un niveau de résolution j , (classique Kronig-Penney's modèle).

Les résultats numériques de l'énergie et la fonction d'onde du système; sont donnés dans le tableau et le figuresuivant :

n résultat	E (analytique)	E (ondelettes) (j=4)	E (ondelettes) (j=6)
1	0.108378383138	0.108378333941	0.108378383133
2	0.116547065733	0.116547012822	0.116547065728
3	0.123694250775	0.123694194614	0.123694250770
4	0.135138972139	0.135138910776	0.135138972133
5	0.132430398605	0.132430338465	0.132430398599
6	0.121907617033	0.121907561667	0.121907617028

Table -4.9: Les résultats calculés de l'énergie E du système , $D8$, $j=4,6$.

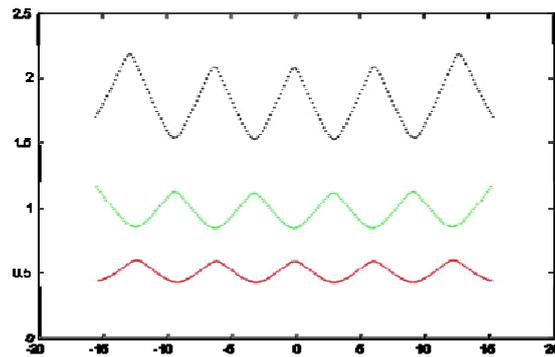


Fig.4.8. l'énergie du système en fonction de vecteur d'onde k pour potentiels creneau, $D10$; $j=8$.

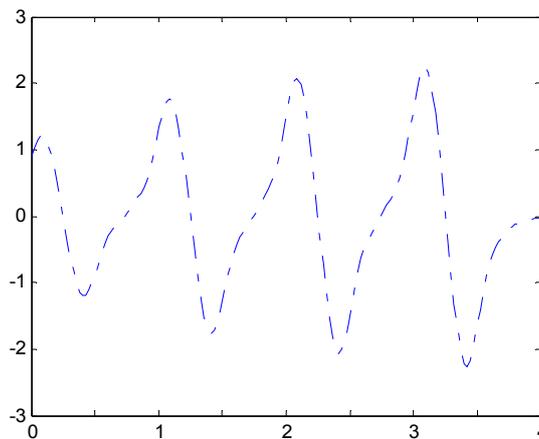


Fig.4.9. la fonction d'onde du système pour les partie potentiels périodique E_6 ; $D10$; $j=8$.

➤ Discussions :

Les résultats de l'énergie sont comparées avec celles théoriques pour différents vecteur d'onde k données dans le tableau 4.9, dans la figure.4.8 les trois bandes d'énergie du système en fonction de vecteur d'onde k pour D10 et un niveau de résolution $j=8$, sont tirées après avoir utilisé les ondelettes appropriées, Il est remarquable de souligner que dans un dé normalisation à constante d'échelle, et la fonction d'onde du $E=-0.8285044$, sont donnés dans figure 4.9, pour D10 et un niveau de résolution $j=8$.

Les résultats montrent que nous pouvons atteindre une haute précision en utilisant seulement un petit nombre des bases.

Références

- [1] G. Beylkin: On the representation of operators in bases of compactly supported wavelets", SIAM J. Numer. Anal, vol6, pp.1716-1740 ,1992.
- [2] I. Daubechies:Ten lectures on wavelets; CBMS-NSF Regional Conf. Series in Applied Mathematics, Society . Appl. Math, Philadelphia, 1992.
- [3] M. El-Gamel, J.R. Cannon : On the solution of second order singularly-perturbed boundary value problem by the Sinc-Galerkin method;Math. Phys. PP.45–58, 2005.
- [4] L. Dianfeng, O.Tadashi : Treatment of Boundary Conditions in the Application of Wavelet-Galerkin Method to a SH Wave Problem, Pure Appl.Math, 1996.
- [5] M.Q. Chen, C.H. Wang, Y.P. Shin : The computation of wavelet-Galerkin approximation on a bounded interval, Int. J. Numer. Meth.Eng; PP.2921–2944;1996.
- [6] J. M. Restrepo, G.K. Leaf : Inner Product Computations Using Periodized Daubechies Wavelets. Mathematics Department, U. California, Los Angeles, Los Angeles, CA 90095 U.S.A; 1997.
- [7] A. Latto, H.L. Resniko; and E. Tannenbaum : The Evaluation of Connection Coefficients of Compactly Supported Wavelets. Aware, Inc. Cambridge, MA 02142 U.S.A;1999.

Conclusion Générale



Conclusion Générale



Cette étude a été consacrée à l'expansion ondelettes, pour résoudre l'équation de Schrödinger. Dans une première phase nous avons abordé un rappel bibliographique sur les notions de base des ondelettes, avec toutes les caractéristiques que cet outil. Nous commencerons par l'introduire de l'analyse de Fourier et sa transformée limitée. par suite nous détaillerons comment est-ce que les ondelettes sont privilégiées transformée Fourier ordinaires.

Dans le second partie, on a justifié le choix des ondelettes Daubechies comme base de l'espace L^2 ; et introduisant les propriétés de l'analyse multi-échelle ; et la description des algorithmes détaillé pour calculer les différents coefficients, comme les coefficients de connexion des ondelettes dans une base orthogonale.

Dans les deux derniers chapitres, nous avons utilisé la méthode des ondelettes-galerkine, pour résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension, en passant par le calcul de Coefficients de Connexion ; en utilisant le programme Matlab pour les résultats des calculs numérique de ces travaux, a fin nous applications d'méthode aux systèmes unidimensionnels. Nous discuterons les résultats obtenus faisant la comparaison avec l'étude théorique.

Ce travail ouvre la perspective de l'application des ondelettes pour étudier les systèmes à un dimension, de trouver d'énergie et la fonction d'onde de ces systèmes, Les résultats reproduire les valeurs numériques très bien bandes d'énergie des semi-conducteurs et la fonction d'onde. Nous nous sommes concentrés sur la démonstration de l'algorithme ainsi que des aspects de calcul. Comme nous l'avons dessus, il est facile de développer cette approche à deux ou en trois dimensions. En outre, il semble que ce soit possible de résoudre l'équation de Schrödinger aux valeurs propres avec une grande précision tout en utilisant seulement un petit nombre de base à l'aide d'ondelettes adaptées. C'est l'objet de nos recherches futures.

ANNEXE

Résumé:

Dans ce travail nous introduisons une nouvelle méthode d'ondelettes pour développer la résolution de l'équation de Schrödinger, équation aux dérivées partielles; «EDP».

Nous utilisons les ondelettes de Daubechies, qui permettent de construire une base compacte et orthogonale. Ces ondelettes sont appliquées dans une analyse multi-résolution, basée sur la méthode de Galerkin.

Nous mettons en œuvre l'ensemble des outils qui permettent de développer cette analyse et explicitons cela sur un exemple simple de l'équation de Schrödinger à une dimension. Nous calculerons les énergies et les fonctions d'onde, pour un système quantique dans un potentiel aux variations brutales.

Ce travail est ainsi un préliminaire à des développements plus réaliste et sophistiqués, dans des dimensions supérieures 2-d et 3-d.

Mots clés : *méthode d'ondelettes-Galerkin; analyse multi-échelle; coefficients de connexion; ondelettes de Daubechies; équation de Schrödinger.*

المخلص

في هذا البحث قدمنا نبذة عامة عن تحويلات الموجات الحديثة نسبياً التي تغلبت على نقائص تحويلات فورييه، حيث تعتبر من أهم النظريات الرياضية المستخدمة في الحل العددي التقريبي للمعادلات التفاضلية الجزئية (م.ت.ج)، وفي هذا الإطار نطرح أسس التحليل المتعدد السلالم وخصائصه مع تقنيات تحديد معاملات الاتصال.

كما قدمنا خوارزم لطريقة موجات-غلاخين، لحل معادلة شرودنجر باستخدام موجات دبوشيس وبتطبيقاتها على الانظمة أحادية البعد مثبتين انها أكثر فعالية وارضية خصبة في الحالات الثنائية والثلاثية البعد.

الكلمات المفتاحية: طريقة موجات-غلاخين، التحليل المتعدد السلالم، معاملات الاتصال، معادلة شرودنجر، موجات دبوشيس.

Abstract:

In this work we introduce a new wavelet method to develop the resolution of the Schrödinger equation, partial differential equation, " PED's " .

We use the Daubechies's wavelets, which allow to build a compact and orthogonal base. These wavelets are applied in a multi-resolution analysis based on the Galerkin method.

We use all the tools to develop this analysis and then explain that on a simple example of the Schrödinger equation of one dimension. We calculate the energies and wave functions for a quantum system in a potential for sudden changes.

This work is preliminary and has a more realistic and sophisticated developments in higher dimensions 2-d and 3-d.

Keywords : *Wavelet-Galerkin method; multiresolution ;connection coefficients; Daubechies's wavelet ;Schrödinger equation.*