

Analyse numérique de la supraconductivité

Numerical analysis of superconductivity

François Alouges^a Virginie Bonnaillie^a

^a*Département de Mathématique, UMR CNRS 8628, Université Paris Sud, 91405 Orsay Cedex, France*

Résumé

Motivated by the superconductivity, we are interested in the fundamental state of the Schrödinger operator with magnetic field. In this paper, we propose a numerical approach based on the finite elements method to determine the bottom of the spectrum of this operator in general domains. We improve the numerical results by using mesh-refinement techniques based on a posteriori error estimators developed elsewhere. We also look at the monotonicity of the bottom of the spectrum in an angular sector according to the angle to complement the theoretical study of Bonnaillie (C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 336 (2) (2003) 135-140). *To cite this article : F. Alouges, V. Bonnaillie, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 337 (8) (2003).*

Résumé

Le regain d'intérêt pour la théorie de la supraconductivité motive les travaux liés à la détermination de l'état fondamental de l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique. Dans cet article, nous proposons une approche numérique basée sur la méthode des éléments finis afin de déterminer le bas du spectre de cet opérateur dans des domaines généraux. Nous améliorons les résultats numériques à l'aide de techniques de raffinement de maillages liées aux estimateurs a posteriori développés ailleurs. Nous regardons également la monotonie du bas du spectre sur un secteur angulaire selon l'angle du domaine afin de compléter l'étude théorique de Bonnaillie (C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 336 (2) (2003) 135-140). *Pour citer cet article : F. Alouges, V. Bonnaillie, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 337 (8) (2003).*

Abridged English version

Superconductivity behavior is described by the properties of the minimizers of the Ginzburg-Landau's functional given in (1). The computation of the Hessian of \mathcal{G} leads to analyze the Schrödinger operator with magnetic field. Due to gauge invariance, the bottom of the spectrum depends only on the magnetic field and its expression is given in (2). For numerical computations, we restrict the analysis to constant magnetic field.

Email addresses: Francois.Alouges@math.u-psud.fr (François Alouges), Virginie.Bonnaillie@math.u-psud.fr (Virginie Bonnaillie).

Recalling in Proposition 1.1 the effect of the translation of the domain on the fundamental state and the invariance of the bottom of the spectrum, we see that the standard method consisting in constructing the mass and assembling matrix is inefficient as it is illustrated in Figure 1 : the numerical solution computed on translated domains is not the solution given by (3), deduced from the solution in the initial domain.

It is suggested in [8,1,3] that the fundamental state is exponentially decreasing fast away of the smallest corners for a constant and large magnetic field. This implies that the associated numerical problem is badly conditioned and the determination of the ground state is particularly difficult.

We propose an equivalent method (assuming that the eigenfunction has no zero) invariant under some gauge transform and so under translation. The new formulation is expressed in (4) and results are presented in Figure 2.

It is possible to construct an a posteriori error estimator defined on (5), developed in [2] to know, using only computed numerical solution and data of the problem, if the numerical solution is close to the exact solution with a prescribed accuracy. Theorem 3.1 gives an estimate of the gap between numerical and exact solutions according to these estimators. Such estimators are particularly adapted for mesh-refinement techniques and we compare in Figures 5 and 1 results coming from uniform and localized refinement.

Then we apply these techniques to determine numerically the bottom of the spectrum in angular sector and look at the monotonicity according to the angle of the sector by noticing that we can cut the angular sector by a piece of circle so that the boundary is still smooth except at the corner and the bottom of the spectrum does not change if the cutting is quite far the corner. The numerical results are presented in Figure 7 and are in perfect agreement with theoretical estimates obtained in [3].

1. Introduction

Comme le détaillent [9,7], le comportement supraconducteur d'un matériau est décrit par les minimiseurs de la fonctionnelle de Ginzburg-Landau :

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

définie pour $\psi \in H^1(\Omega)$ et $\mathcal{A} \in H^1(\Omega)$. La fonction ψ est appelée paramètre d'ordre et son amplitude rend compte de la densité d'électrons supraconducteurs. Le champ \mathcal{H} représente le champ magnétique appliqué, \mathcal{A} le potentiel magnétique induit et κ une caractéristique du matériau. L'expérience physique montre qu'un champ magnétique extérieur trop intense détruit la supraconductivité. En linéarisant l'équation d'Euler associée à la fonctionnelle \mathcal{G} au voisinage de l'état normal ($\psi = 0$), nous sommes amenés à étudier l'opérateur de Schrödinger.

La fonctionnelle \mathcal{G} est invariante par changement de jauge car $\mathcal{G}(\psi, \mathcal{A}) = \mathcal{G}(\psi e^{i\kappa\phi}, \mathcal{A} + \nabla\phi)$.

Considérons \mathcal{A} un potentiel magnétique de champ $B = \text{rot}\mathcal{A}$ associé, Ω un domaine de \mathbb{R}^2 à bord lipschitzien et notons Γ' le bord du domaine où la normale extérieure ν est définie. La réalisation de Neumann de l'opérateur $P_{\mathcal{A},\Omega} = -\nabla_{\mathcal{A}}^2$, avec $\nabla_{\mathcal{A}} = \nabla - i\mathcal{A}$ est définie sur :

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

Grâce à la propriété d'invariance de jauge, le bas du spectre de l'opérateur $P_{\mathcal{A},\Omega}$ ne dépend que du champ magnétique, nous définissons ainsi :

$$\mu(B, \Omega) := \inf_{u \in H_{\mathcal{A}}^1(\Omega), u \neq 0} \frac{\|\nabla_{\mathcal{A}} u\|_{L^2(\Omega)}^2}{\|u\|_{L^2(\Omega)}^2}, \text{ avec } H_{\mathcal{A}}^1(\Omega) := \{u \in L^2(\Omega) \mid (\nabla - i\mathcal{A})u \in L^2(\Omega)\}. \quad (2)$$

Nous choisissons $\mathcal{A}_0 := \frac{1}{2}(x_2, -x_1)$ un potentiel magnétique d'intensité constante 1. Rappelons deux propriétés simples mais qui auront un rôle important pour la modélisation numérique :

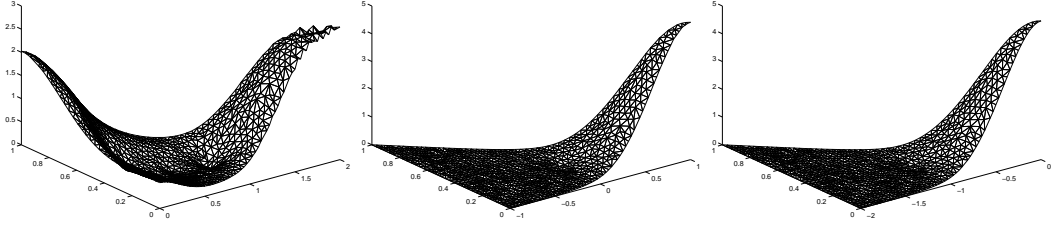


FIG. 1. État fondamental sur des domaines tradés.

FIG. 2. Fundamental state for translated domains.

Proposition 1.1

- Soit Ω un domaine invariant par dilatation, alors le spectre de l'opérateur $P_{B\mathcal{A}_0, \Omega}$ est celui de $P_{\mathcal{A}_0, \Omega}$ multiplié par B et les vecteurs propres se transportent par dilatation.
- Soit $\Omega^t := \{x \in \mathbb{R}^2 \mid x - t \in \Omega\}$. Alors $P_{B\mathcal{A}_0, \Omega}$ et $P_{B\mathcal{A}_0, \Omega^t}$ sont unitairement équivalents. De plus, u est vecteur propre de $P_{B\mathcal{A}_0, \Omega}$ si et seulement si u_t est vecteur propre de $P_{B\mathcal{A}_0, \Omega^t}$, avec :

$$\forall x \in \Omega^t, u_t(x) = e^{i\frac{B}{2}x \wedge t} u(x - t). \quad (3)$$

Nous cherchons une solution approchée à l'aide de la méthode des éléments finis en nous restreignant à des potentiels de la forme $\mathcal{A} = B\mathcal{A}_0$. Nous considérons \mathcal{T}_h une triangulation du domaine Ω et notons ϕ_i les fonctions de base associées aux éléments finis \mathbb{P}^k . La méthode standard consiste à construire les matrices de masse M et d'assemblage A dont les coefficients sont des approximations numériques des intégrales $\int_{\Omega} \phi_i \overline{\phi_j} dx$ et $\int_{\Omega} \nabla_{\mathcal{A}} \phi_i \cdot \overline{\nabla_{\mathcal{A}} \phi_j} dx$ et par suite à déterminer la plus petite valeur propre généralisée : $AU = \mu_h MU$ (nous proposons dans [4] un algorithme qui permet de déterminer des valeurs propres généralisées). Mais cette formulation n'est pas invariante par changement de jauge, comme le montre la Figure 1 donnant les modules des vecteurs propres associés à trois domaines tradés pour un maillage à 1500 éléments, une résolution \mathbb{P}^2 et un champ $B = 50$. Les valeurs propres calculées numériquement valent respectivement 21.689, 12.122 et 12.022.

Pour capter les oscillations générées par une translation de domaine, dues au terme $e^{i\frac{B}{2}x \wedge t}$, il faut que la taille du maillage soit inversement proportionnelle au champ magnétique.

De plus, le traitement numérique de ce problème est d'autant plus difficile qu'on s'attend à une concentration de module dans une partie du bord et une décroissance exponentielle avec l'éloignement du bord, comme le montrent [8,1,3], le problème est donc mal conditionné.

2. Formulation équivalente

Nous allons donc proposer une formulation équivalente en prenant comme inconnue la phase. Supposons que le vecteur propre ne s'annule pas et décomposons u sous la forme : $\forall x \in \Omega, u(x) = \rho(x)e^{i\theta(x)}$, alors :

$$\int_{\Omega} |(\nabla - i\mathcal{A})u|^2 dx = \int_{\Omega} |(\nabla - i(\mathcal{A} - \nabla\theta))\rho|^2 dx. \quad (4)$$

Définissons l'opérateur $P_{\mathcal{A}, \Omega}^{\theta}$ par $P_{\mathcal{A}, \Omega}^{\theta}\rho := -\nabla^2\rho + \rho|\mathcal{A} - \nabla\theta|^2$. Le changement de jauge en θ montre que $P_{\mathcal{A}, \Omega}(\rho e^{i\theta}) = e^{i\theta} P_{\mathcal{A}, \Omega}^{\theta}\rho$, donc il est équivalent de déterminer un vecteur propre de phase θ et de module ρ pour $P_{\mathcal{A}, \Omega}$ et un vecteur propre réel ρ pour $P_{\mathcal{A}, \Omega}^{\theta}$. Remarquons que si l'espace de discrétisation de θ contient les fonctions linéaires, alors le problème est invariant par translation. De cette formulation se déduit un algorithme pour déterminer l'état fondamental de $P_{\mathcal{A}, \Omega}$:

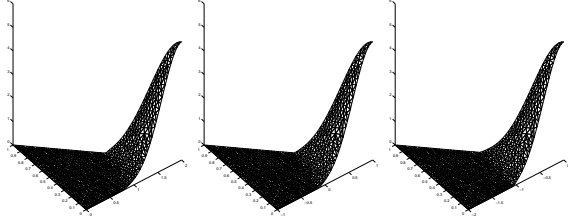


FIG. 3. Modules et argument d'état fondamental sur des domaines tradlatés.

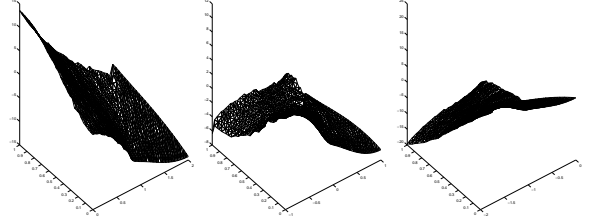


FIG. 4. Modules and phasis of fundamental state on translated domains.

Algorithme 2.1

- Choix initial de θ et ρ .
- Détermination de la phase θ qui minimise la fonctionnelle $J_\rho(\theta) := \|\rho \nabla \theta\|_{L^2}^2 - 2 \int_\Omega \rho^2 \mathcal{A} \cdot \nabla \theta \, dx$.
- Détermination de la plus petite valeur propre μ_h et du vecteur propre ρ associés à l'opérateur $P_{\mathcal{A},\Omega}^\theta$.
- Répétition avec le nouveau couple (θ, ρ) .

La première phase calculée par cet algorithme est bien déterminée et régulière car le module ρ initial est quelconque. Nous calculons ensuite l'état fondamental ρ pour l'opérateur $P_{\mathcal{A},\Omega}^\theta$. La contribution de ρ dans la fonctionnelle J_ρ est négligeable dans les zones où ρ l'est. La phase θ calculée pour minimiser J_ρ restera donc inchangée dans ces zones. Le problème de minimisation se ramène à un domaine plus petit où ρ n'est pas négligeable. Nous évitons ainsi le problème de la détermination de la phase quand le module est très petit : l'étape d'initialisation écarte cette difficulté.

Reprenons les mêmes maillages qu'à la Figure 1, les résultats du nouvel algorithme sont présentés à la Figure 2, nous trouvons comme valeur propre 12.062, 12.071 et 12.065 respectivement. De plus, si nous visualisons l'écart entre les phases calculées sur deux domaines tradlatés, nous obtenons exactement le graphe de $\frac{B}{2}x \wedge t$.

3. Estimateurs d'erreurs

Afin de valider la robustesse et la performance de cet algorithme, nous avons besoin d'un critère permettant, uniquement à l'aide des données du problème et des estimations numériques, de contrôler l'écart entre la solution exacte et la solution numérique. Nous construisons ainsi des estimateurs d'erreurs en s'inspirant des travaux [5,6,10,2]. Soit u_h une solution du problème approché, nous définissons :

$$\forall T \in \mathcal{T}_h, \eta_T^2 := h_T^2 \int_T |\nabla_{\mathcal{A}}^2 u_h - \mu_h u_h|^2 + \sum_{E \in \mathcal{E}(T) \cap \mathcal{E}_{h,\Omega}} h_E \int_E |[n_E \cdot \nabla_{\mathcal{A}} u_h]_E|^2. \quad (5)$$

Théorème 3.1 Soit $[\mu, u]$ une solution exacte avec u normalisé. Soit $[\mu_h, u_h] \in \mathbb{P}^2$ une solution du problème approché avec u_h normalisé. Il existe alors des constantes c_1, c_2 telles que :

$$|\mu - \mu_h| + \|u - u_h\|_{H_{\mathcal{A}}^1(\Omega)} \leq c_1 \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_T^2 \right\}^{1/2} \quad \text{et} \quad \left\{ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_T^2 \right\}^{1/2} \leq c_2 \{ |\mu - \mu_h| + \|u - u_h\|_{H_{\mathcal{A}}^1(\Omega)} \}. \quad (6)$$

Ce théorème permet d'appliquer des techniques de raffinement de maillages et donc de déterminer la solution avec une certaine précision grâce à l'algorithme suivant :

Algorithme 3.2

- Donnée d'un maillage initial grossier.

- Calcul d'une solution approchée $(\rho e^{i\theta}, \mu_h)$ par l'algorithme 2.1.
- Calcul des estimateurs η_T .
- Construction d'un nouveau maillage en raffinant les éléments T où l'estimateur η_T est trop grand.
- Répétition avec le nouveau maillage.

La Figure 5 permet de comparer les maillages et modules associés aux calculs provenant de raffinements uniforme et localisé et le tableau 1 compare ces résultats.

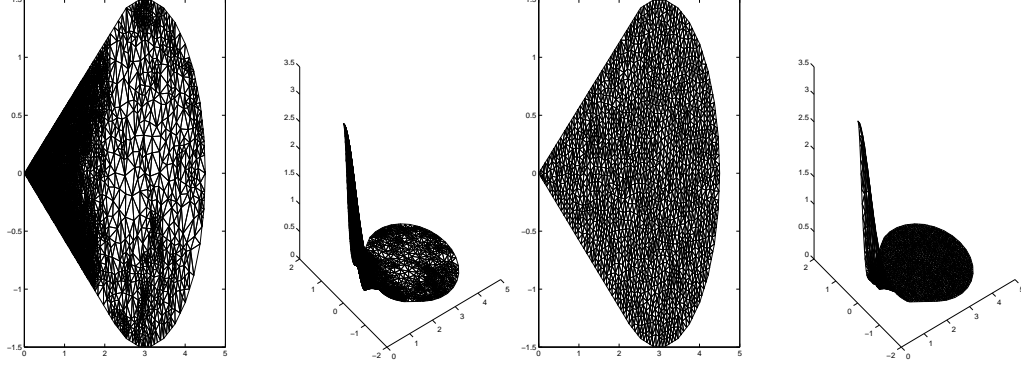


FIG. 5. Comparaison entre raffinement localisé et uniforme

FIG. 6. Comparison between uniform and localized refinement

TAB. 1

Comparaison maillage localisé - maillage uniforme.

TAB. 2

Comparison between localized and uniform mesh.

Raffinement localisé			Raffinement uniforme		
nombre d'éléments	$\sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_T^2}$	μ_h	nombre d'éléments	$\sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_T^2}$	μ_h
38	15.572444	38.993385	38	15.569330	39.711605
206	12.826912	9.037603	193	12.826351	8.227542
1726	12.628898	0.792354	1349	12.641156	2.059195
3807	12.627361	0.272165	3593	12.630521	0.772448
8219	12.626788	0.104900	9583	12.627457	0.279150

4. Applications

Cette technique permet d'étudier le comportement du bas du spectre, noté $\mu(\alpha)$, de l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique constant sur un secteur angulaire d'angle α . En effet, lorsque l'on coupe un secteur angulaire par une portion de cercle (de manière à ne pas introduire de nouveau point singulier sur le bord), nous remarquons que le bas du spectre, calculé numériquement, ne varie pas à partir du moment où la troncature est assez éloigné du coin du secteur. Ceci est en parfait accord avec les résultats théoriques [3] qui montrent que l'état fondamental est exponentiellement décroissant en s'éloignant du coin. Par conséquent, la troncature n'influence pas la valeur du bas du spectre à une quantité exponentiellement petite près. Les estimations numériques de $\mu(\alpha)$ sont données à la Figure 7 qui reprend également la zone de localisation déterminée par les estimations de [1,3] :

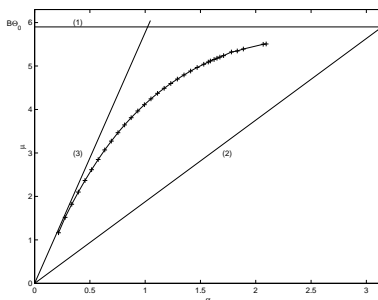


FIG. 7. Localisation et estimations de $\mu(\alpha)$, $B=10$

FIG. 8. Localization and estimates of $\mu(\alpha)$, $B=10$

$$\forall \alpha \in]0, \pi[, \Theta_0 \frac{\alpha}{\pi} \leq \mu(\alpha) \leq \min \left(\Theta_0, \frac{\alpha}{\sqrt{3}} \right), \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\mu(\alpha)}{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

5. Conclusion

Nous avons ainsi obtenu une méthode numérique qui respecte les propriétés de l'opérateur de Schrödinger et construit des estimateurs a posteriori pour contrôler l'erreur avec la solution exacte. Les questions de localisation pour un domaine qui admet deux sommets d'angle minimal sont complètement ouvertes et il pourrait être intéressant de tester la méthode numérique sur de tels domaines afin d'avancer quelques conjectures sur le comportement de l'état fondamental.

Références

- [1] V. Bonnaillie, On the fundamental state for a Schrödinger operator with magnetic field in a domain with corners, C. R. Acad. Sci. **336-2**, (2003) p 135-140.
- [2] V. Bonnaillie, A posteriori error estimator for the eigenvalue problem associated to the Schrödinger operator with magnetic field, submitted (april 2003).
- [3] V. Bonnaillie, On the fundamental state energy for a Schrödinger operator with magnetic field in domains with corners, submitted (june 2003).
- [4] V. Bonnaillie, Superconductivity in general domains. (en préparation) (may 2003).
- [5] D. Braess, *Finite elements*, (Cambridge University Press, 2001).
- [6] P. Clément, Approximation by finite element functions using local regularization. R. A. I. R.O., **R-2**, (1975) p. 77-84.
- [7] P. G. de Gennes, *Superconductivity in metals and Alloys* (Addison Wesley, 1989).
- [8] B. Helffer and A. Morame, Magnetic bottles in connection with superconductivity, J. of Functional Analysis **185**, (2001) p. 604-680.
- [9] D. Saint-James and P. G. de Gennes, Onset of Superconductivity in decreasing fields. Phys. Let. **7** (5), p. 306-308 (1963).
- [10] R. Verfürth, *A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh refinement technique* (Wiley Teubner, 1996).