République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي;
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة الجيلالي بونعامة خميس مليانة
Université Djilali Bounaâma de Khemis Miliana
Faculté des Sciences et de la Technologie
Département des Sciences de la Matière



Mémoire de fin d'étude

En vue de l'obtention d'un diplôme de **Master** en Physique **Spécialité**: Physique théorique

Thème:

Résolution d'un problème physique via la Théorie du point fixe

Devant le jury composé de :

Mr. H. BOUKABCHA
 Mr. S. BENTRIDI
 Mme. S. AYADI
 Examinateur
 Encadreur

Présenté par :

BENEDDINE HOURIA DAOUAR HASSIBA

Année universitaire : 2019 / 2020



Je dédie ce projet de fin d'études a mon père Kouider, qui m'a toujours poussé et motivé dans mes études, a ma très chère mère Saada pour leurs sacrifiasses et tous les efforts qu'elle a fait pour mon éducation ainsi que ma formation, a mes frères :

Abdelkader, Salim, Rachid, Sarhan et Mohammed et mes sœurs : Karima, Fatima, Wissame et Khadija.

A mon mari: Hani sa mère Khaira et son père Ahmed et touts sa famille. A tous mes amis surtout Hassiba, Bakhta, Aicha, Samira, Chafia et Zohra.

A tous cues qui ont une relation de proche ou de loin avec la réalisation de mémoire.

BENEDDINE Houría

Je dédie ce modeste travail a mes très chers Parents A mes frères Mawloud, Ismail et Abdelkader, mes sœurs Khaira, Houda, Naima, Karima, Malika, Hafidha, Faiza et Amina. A toute ma famille et amies pour leurs support et encouragement.

DAOUAR Hassiba

Remerciements

En premier lieu, nous remercions "ALLAH" le tout puissant qui m'a donné la force, la volonté et le courage pour accompli ce modeste travail.

Nous remercions madame AYADI SOUAD, enseignante à l'université de Khémis Miliana d'avoir encadré notre travail. Nous la remercions aussi pour sa patience, son soutien, elle est toujours volontaire et prête à nous aider pour avancer. Pour tout ce qu'elle nous à appris sur le mathématiques. Nous voulions lui dire mille fois merci.

Mes vifs remerciements vont également, aux membres du jury, pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre recherches en acceptant d'examiner notre travail et de l'enrichir par leurs propositions

Mr H. BOUKABCHA

Mr S. BENTRIDI

Un grand merci à tous ceux qui nous ont aidé à accomplir ce travail.

Nous tenons à remercier tous les enseignants qui nous ont guidé durant tous ces années d'études.

Enfin, nous tenons à remercier tous les responsables et enseignants de département des sciences de la matière.

Daouar et Beneddine

ملخص

مذكرة ماستر: حل مسألة فيزيائية باستعمال نظرية النقطة الصامدة.

في هذه المذكرة قمنا بنمذجة مشكلة فيزيائية و التعبير عنها بمعادلة رياضية من نوع فولتيرا التكاملية، لاثبات أن هذه المعادلة تقبل حل اعتمدنا على نظرية من نظريات النقطة الصامدة و المعروفة باسم مبرهنة باناخ. وقد تمت الإشارة الى بعض الطرق العددية التي تعتبر أكثر دقة لمقاربة حل هذه المعادلة.

الكلمات المقتاحية: معادلة فولتيرا التكاملية ، نقطة ثابتة ، التصادم الذري عدد الازاحة لكل ذرة ، قسم كفاءة الاصطدام الذري.

Résumé

Mémoire de master : Résolution d'un problème physique via la théorie de point fixe. Dans ce mémoire, nous avons modélisé un problème physique par une équation intégral de type Volterra de seconde espèce. Pour résoudre cette équation nous avons utilisé un théorème de point fixe dit théorème de contraction de Banach. Nous avons cité la méthode numérique des splines cubiques qui est la plus précise pour approcher la solution de cette équation.

Mots clés équation intégral de Volterra, point fixe, collision atomique, nombre de déplacement par atome, section efficace de collision atomique.

Abstracts

Master thesis: Solving a physic problem via fixed point theorems.

In this thèses, we model a physical problem by an integral equation of type Volterra of the second kind. To solve this equation we use a fixed point theorem namely Banach fixed point. We have cited a numerical method which gives an approach solution with maximum of precision.

Keywords Integral Volterra equation, fixed point, atomic collision, number of displacements per atom, atomic collision cross section.

Table des matières

| Introdution | | 1 - |
|----------------------|---|--------|
| Chapitre 01 Noti | ions fondamentales | 3- |
| 1.1 Espace fonction | onnelle | 3 - |
| 1.1.1 Définitions | (Rappelles) | 3 - |
| 1.2 Notion sur les | opérateurs intégraux | 4 - |
| 1.2.1 Opérateur in | ntégral linéaire | 5 - |
| 1.2.2 Opérateur i | intégral produit | 5 - |
| 1.2.3 Opérateur c | contractant | 5 - |
| 1.3 Notions de ph | ysique | 6 - |
| 1.3.1 La théorie s | statistique de création des dommages | 6 - |
| 1.3.2 Le nombre | de déplacement : | 9 - |
| 1.3.3 Section effica | ce de collision atomique | - 10 - |
| Chapitre 02 Equa | ation intégrale de VOLTERRA | · 13 - |
| 2.1 Définitions | | - 13 - |
| 2.1.1 Equation in | ntégrale | - 13 - |
| 2.1.2 Equation Ir | ntégrale linéaire de Volterra | - 13 - |
| 2.1.3 Equation In | tégrale non linéaire de Volterra | - 14 - |
| 2.2 Intégration Nu | umérique | - 14 - |
| 2.2.1 Quelque mé | éthode de résolution approchés | - 15 - |
| 1) Méthode du noy | au dégénéré | - 15 - |
| 2) Méthode d'appre | oximations successives | - 17 - |
| 3) Intégration par | interpolation | 17- |
| , <u> </u> | lynomiale et splines | |
| | polynomialepar des splines | |
| | Résolution Numérique de Equation Intégral linéaire de Volterra par spline i | |
| polynomiale 11,12 | | - 29 - |
| Chapitre 03 Equa | ation intégrale de la théorie statistique des dommages | 34 - |
| Introduction | | - 34 - |
| 3.1 Formalisme ma | athématique : | · 36 - |
| 3.2 Etude Théoriqu | ie | · 36 - |
| 3.3 Etude Numéria | iue | - 41 - |

| Conclusions - 47 | - |
|------------------------------|---|
| Références bibliographies 48 | - |

INTRODUTION

Le bombardement, par neutrons et principalement par neutrons rapides, est le principale source de déplacements atomiques dans les matériaux. Les tests sont actuellement réalisés en réacteurs de recherche à neutrons rapides, on a haut flux de neutrons thermiques, permettant d'obtenir une vitesse d'irradiation suffisante. Dans le cas des métaux (ou aciers), on détermine le nombre de déplacement par atome (d. p. a) par la connaissance de flux et du spectre de neutrons, pondéré par une section efficace de création de dommage ou fonction de dommages conventionnelle [18], [9].

Un atome primaire de type " i " d'énergie E est capable déplacé un autre atome de type " j " soit directement soit après avoir choqué un atome de type " k ", si l'atome choqué est monoatomique le problème du calcul de l'énergie déposée sous forme de dommage dans un solide monoatomique bombardé par des ions de haut énergie et le passage de cette énergie de dommage au nombre de déplacements par atome (d. p. a) a été résolu par Lindhard et Robinson. Mais si l'atome choqué dans un composé poly-atomique est également poly-atomique le problème du calcul l'énergie déposé où le nombre de déplacement par atome c'est pas facile et plus délicat car :

- la partition de l'énergie de dommage entre les divers types d'atome ne peut se calculer simplement [20],
- 2) les énergies de seuil de déplacement peuvent différer d'un type d'atome à l'autre.
- 3) une cascade de déplacement initiée par un atome de nature donnée se développe en mettent en jeu les autre types d'atomes.

Nous avons l'aide est de modifier quelque peu l'équation de Lindhard et peut être généralisée à l'état dans lequel le corps solide est monoatomique où l'on a séparé la contribution des collisions primaires et des cascades. Le nombre d'atomes déplacés par un atomes de même nature que la cible animé d'une énergie E, $n_{11}(E)$ obéit à une équation semblable :

$$S_1(E)\frac{dn_{11}(E)}{dE} = \int P_1(T)P_1(E-T)d\sigma_{11}(E,T) + \int n_{11}(T)d\sigma_{11}(E,T)$$

On peut sans mal généraliser cette équation au cas d'un solide poly-atomique comprenant p types d'atomes. Les $n_{1j}(E)$ étant solution du système de p équations suivant :

$$S_1(E)\frac{dn_{1j}(E)}{dE} = C_j \int P_j(T)P_j(E-T)d\sigma_{1j}(E,T) + \sum_{k=1}^p C_k \int n_{kj}(T)d\sigma_{1k}(E,T), \quad j = 1,2,...,p$$

Ce phénomène physique à été modélisé par une équation intégrale très connu dans la théorie mathématiques qui s'appelle l'équation de Volterra de seconde espèce qui s'écrit sous la forme

$$u(x) = \int_{E} k(x, t, u(t))dt + f(x)$$

Ce type d'équations de Volterra est issu de plusieurs modèles physiques, biologiques et chimiques [10], [16].

Dans ce travail nous allons utiliser le théorème de point fixe de Banach pour prouver l'existence de la solution de notre problème. D'autre part, nous allons faire une étude numérique en se basant sur les méthodes des splines cubiques dont leur utilisation dans des problèmes d'interpolation sont préférées par rapport aux méthodes classiques d'interpolation polynomiale.

Ce mémoire est réparti on trois chapitres :

Dans le premier chapitre, on commence par un rappelle sur les notions importantes de mathématiques qu'on va utiliser dans le mémoire, ainsi que les notions importantes de physiques.

Dans le deuxième chapitre, nous allons parler de l'équation intégrale de Volterra (linéaire et non linéaire) de première espèce et de seconde et quelque méthodes numériques qui peuvent être utilisées dans la résolution de cette équation.

Le troisième chapitre, qu'est la parti principale de notre mémoire il englobe le théorème d'existence de la solution qui donne le nombre de déplacement, et la méthode de spline cubique pour approcher la solution de cette équation.

CHAPITRE 01

Notions fondamentales

Ce chapitre est consacré essentiellement à l'introduction de quelques notions fondamentales et certaines définitions et théorèmes que nous utiliserons dans les autres chapitres.

1.1 Espace fonctionnelle

1.1.1 Définitions (Rappelles)

Définition 1.1.1 (Espèce métrique) Un espace métrique (X,d) est un ensemble X muni d'une application

$$d: X \times X \mapsto \mathbb{R}^+$$
$$x, y \mapsto d(x, y)$$

appelée distance ou métrique, possédant les trois propriétés qui suivant :

- i. $\forall x, y \in X : d(x, y) = 0 \iff x = y$.
- ii. $\forall x, y \in X : d(x, y) = d(y, x)$ (la symétrie).
- iii. $\forall x, y, z \in x : d(x, z) \le d(x, y) + d(y, z)$ (l'inégalité triangulaire).

Définition 1.1.2 (Espace métrique complète) On dit que *X* est un espace métrique complète si toute suite de cauchy de *X* converge dans *X*.

Définition 1.1.3 (**Espace vectorielle normé**) Soit X un espace vectoriel sur le corps $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ ou \mathbb{C} , on appelle norme sur l'espace X toute application notée $\|.\|$ défini sur X à valeurs dans \mathbb{R}_+ , vérifiant pour tout x, y dans X et α dans \mathbb{K} .

- i. ||x|| = 0 si seulement si x = 0.
- ii. $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$ (homogènéité).
- iii. $||x + y|| \le ||x|| + ||y||$ (inégalité triangulaire).

Tout espace vectoriel muni d'une norme est appelé espace vectoriel normé.

Définition 1.1.4 (Espace de Banach) Tout espace vectoriel normé complet est appelé espace de Banach.

Exemple: $(\mathbb{R}, | \cdot |)$ est un espace complet.

Proposition : Tout espaces vectoriels normés de dimension fini est un espace de Banach.

Définition 1.1.5 (produit scalaire) Soit \mathcal{H} un espace vectoriel réel ou complexe. Un produit scalaire est une application $\langle .,. \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$, si \mathcal{H} un espace vectoriel complexe, et $\langle .,. \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{R}$, si \mathcal{H} un espace vectoriel réel, vérifiant :

- i. $\forall y \in \mathcal{H} : x \mapsto \langle x, y \rangle$ est linéaire (en x).
- ii. $\langle y, x \rangle = \overline{\langle x, y \rangle}$.
- iii. $\langle x, x \rangle \ge 0$ et si $\langle x, x \rangle = 0$ alors x = 0.

Par conséquent $y \mapsto \langle x, y \rangle$ est anti-linéaire (en y) si \mathcal{H} un espace vectoriel complexe.

Exemple:

$$||x|| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$$
. (la norme associée au produit scalaire).

Définition 1.1.6 (Espace de Hilbert) Un espace de Hilbert est un espace vectoriel muni d'un produit scalaire, et qui complet pour la norme associée à ce produit scalaire.

Définition 1.1.7 (Espace $L^1(\Omega)$) Soit Ω un ouvert de \mathbb{R}^n , on désigne par $L^1(\Omega)$ des fonctions intégrable sur Ω à valeur dans \mathbb{R} , on pose

$$||f||_1 = \int\limits_{\Omega} |f(x)| dx$$

Définition 1.1.8 (Espace $L^p(\Omega)$) Soit $1 \le p < \infty$, on pose

$$L^p(\Omega) = \{f : \Omega \to \mathbb{R}, f \text{ mesurable et } |f(x)|^p \in L^1(\Omega)\}$$

muni de la norme

$$||f||_{L^p} = ||f||_p = \left(\int_{\Omega} |f(x)|^p dx\right)^{\frac{1}{p}}.$$

Inégalité de Holder

Soient p, q > 1 deux exposants tels que

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$$
 et $f \in L^p$, $g \in L^q$ alors,

$$f.g \in L^1$$
 et $\int |f.g| \le ||f||_p . ||g||_q$.

Un cas particulier de l'inégalité de Holder

pour
$$q = 2$$
, on a

$$\int |f.g| \ dx \le \left(\int |f|^2 \ dx\right)^{\frac{1}{2}} \left(\int |g|^2 \ dx\right)^{\frac{1}{2}}$$

Cette inégalité est appelée inégalité de Cauchy – Schwarz [4].

1.2 Notion sur les opérateurs intégraux

1.2.1 Opérateur intégral linéaire

Définition 1.2.1 : Soit k une fonction mesurable sur $\Omega \times \Omega$. Alors la forme général d'un opérateur intégral linéaire A, dit aussi opérateur à noyau, est formellement donné par, l'expression

$$Au(x) = \int_{\Omega} k(x,t) u(t) dt$$

1.2.2 Opérateur intégral produit

Soient A_1 et A_2 deux opérateurs intégraux sur $L_p(E)$ avec des noyaux k_1 et k_2 respectivement, l'opérateur produit noté A_1 A_2 envoie aussi $L_p(E)$ dans $L_p(E)$, ou

$$(A_1A_2)u = A_1 (A_2u)$$

Si les noyaux k_1 et k_2 justifient l'inter changement de l'ordre d'intégration alors, on peut déduire le noyau k du produit A_1A_2 en fonction de k_1 et k_2

$$A_1 A_2 u(x) = \int k_1(x, z) dy \int A_2 u(z) dz$$
$$= \int k_1(x, z) dz \int k_2(z, y) u(y) dy$$
$$= \int u(y) dy \int k_1(x, z) k_2(z, y) dz$$

D'où l'opérateur A_1A_2 est un opérateur intégral de noyau,

$$k(x,y) = \int k_1(x,z)k_2(z,y)dz$$

Notons que si, on prend $A_1=A_2=A$, de noyau $k_1=k_2=k$, alors l'opérateur $A_1A_2=A^2$ admet le noyau $k_2(x,y)$ donné par

$$k_2(x,y) = \int k(x,z)k(z,y)dz,$$

Par itération le noyau $k_n(x, y)$ de A^n est

$$k_n(x,y) = \int k(x,z)k_{n-1}(z,y)dz.$$

Dans la suite le noyau $k_n(x, y)$ sera appelé noyau itéré de k(x, y).

Définition : (Noyau dégénéré) On appelle noyau dégénéré un noyau de La forme

$$k(x,t) = \sum_{i=1}^{n} a_i(x)b_i(t)$$

Proposition : Soit A un opérateur intégral à noyau dégénéré, l'image de A est de dimension finie.

1.2.3 Opérateur contractant

1. Principe du Banach:

Le théorème du point fixe de Banach, est connue sous le nom principe de contraction de Banach, il est la base de la théorie du point fixe. Ce principe garantit l'existence d'un unique point fixe pour toute application contractante d'un espace métrique complet dans lui-même.

Théorème 1.1 (**Théorème du point fixe de Banach**) Soit *T* une contraction dans un espace de Banach. Alors *T* admet un unique point fixe.

On rappelle la définition du contraction.

Définition 1.2.2: Soit T un opérateur d'un espace de Banach E dans lui-même, T est une contraction (ou application contractante), s'il existe une constante $0 \le k < 1$ telle que, pour tout $x, y \in E$, on'ait

$$||T(x) - T(y)|| \le k ||x - y||$$

2. Généralisation du théorème du point fixe de Banach

Soit T une application dans un espace de Banach X tel que T^n est une contraction dans X $(n \in N)$. Alors T admet un unique point fixe.

Ce n'est pas nécessaire de supposer que T est une application continue.

1.3 Notions de physique

1.3.1 La théorie statistique de création des dommages

Les principaux théories de processus d'endommagement décrits ci-dessous sont basés sur un calcul des atomes déplacés. Ils sont supposés de permettant la corrélation entre différents types d'irradiations, tels sons forme d'ions, de particule alpha et de neutrons de différente énergies. En utilisant le formalisme suivante :

$$N_d = \int_0^\infty w(E)\varphi_E(E)dE$$

où,

 N_d : est le nombre total de déplacements par atome cible.

$$w(E) = \delta_i(E) \int_{E_{p,min}}^{E_{p,max}} \sigma(E_p) P_{E_i}(E, E_p) dE_p$$

avec

 $\delta_i(E)$: est la section efficace du neutron à l'énergie E.

 E_p : l'énergie primaire $(E_{p,min} < E_p < E_{p,max})$.

 $P_{E_i}(E, E_p)$: est la probabilité d'obtenir E à partir du réaction δ_i .

 $\sigma(E_p)$: est le nombre d'atomes déplacés par a primaire d'énergie E.

L'énergie primaire : est l'énergie disponible dans l'environnement et directement exploitable sans transformation. Etant donné les partes d'énergie à chaque étape de transformation, stockage et transport, la quantité d'énergie primaire est toujours supérieure à l'énergie finale disponible. Les sources d'énergie primaire sont multiples : Le pétrole brut, le gaz naturel, les combustibles solides (charbon, biomasse), le rayonnement solaire, l'énergie hydraulique, l'énergie géothermique et l'énergie tirée des combustibles nucléaires.

Parmi les mécanismes étudiés par cette théorie, nous les mentionnons :

1) Collisions élastiques: dans le domaine de faible énergie cinétique (~keV), le processus d'interaction entre un ion et un atome cible est considéré comme une collision élastique binaire entre deux corps. Ce mécanisme de collision est traduit par la conservation de l'énergie cinétique du système de particules impliquées dans la collision, l'énergie interne individuelle de chaque particule reste inchangée, ce qui implique que la configuration électronique des deux partenaires n'est pas modifiée lors d'une collision élastique. Le transfert d'énergie cinétique depuis l'ion à l'atome, est calculé en appliquant les règles de conservation de l'énergie cinétique et de la quantité de mouvement lors de la collision. La figure (1.1) présente la géométrie et les paramètres qui gouvernent le processus de collision dans le repère du laboratoire.

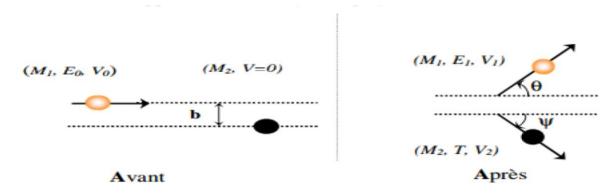


FIG. (1.1) Interaction binaire ion-atome.

2) Collision inélastiques : ce processus de ralentissement domine à haute vitesse. Les collisions inélastiques sont des collisions entre l'ion incident et les électrons de la cible, l'énergie

cinétique totale du système de particules n'est pas conservée. Ainsi l'énergie interne noyau cible électrons est modifiée au cours de l'interaction. Dans le cas d'une collision ion-atome, chacun des deux partenaires peut voir sa population électronique modifiée. Les modifications des configurations électroniques des deux partenaires dépendent des processus fondamentaux intervenant dans les collisions inélastiques telles que, l'excitation, l'ionisation et la capture électronique (Fig. 1.2).

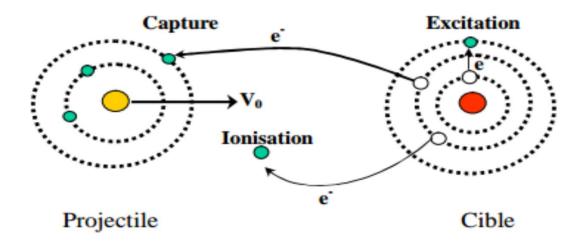


FIG (1.2) Processus inélastiques pendant l'interaction projectile chargé-atome.

- Dans le cas de l'excitation, le transfert d'énergie peut laisser le projectile ou l'atome cible dans un état excité.
 - Dans le cas de l'ionisation, un électron est arraché à un atome cible ou au projectile.
- En ce qui concerne la capture électronique, l'atome cible perd un électron qui est capturé par le projectile. Ce phénomène de capture mène à un changement d'état de charge du projectile et par conséquent à l'ionisation de l'atome cible.
- 3) La fission nucléaire : la fission nucléaire est l'éclatement d'un noyau instable en deux noyaux plus légers et quelques particules élémentaires. Cet éclatement s'accompagne d'un dégagement de chaleur, c'est à dire d'énergie.

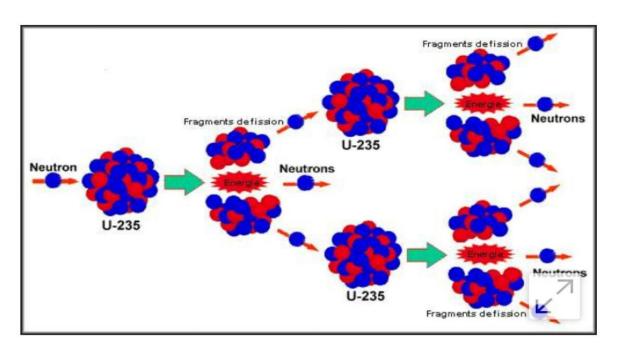


FIG. (1.3) la fission nucléaire.

La fission spontanée existe mais elle est très rare. Le seul élément naturellement fissile est l'uranium 235. Sous l'impact d'un neutron, le noyau se trouve déséquilibré et se transforme en deux noyaux plus légers mais toujours instables appelés produits de fission. Au moment du choc avec le neutron, ces produits de fission sont éjectés à grande vitesse. Les noyaux issus de fission sont dans la plupart des cas radioactifs mais leur période est assez courte.

Dans les neutrons rapides, le spectre d'énergie est constitué par la superposition de neutrons vierges de fission et de neutrons ayant déjà subi un ou plusieurs chocs. Les lois qui régissent le ralentissement des neutrons déterminent donc en chaque point le spectre neutronique [19].

L'énergie secondaire (l'énergie finale): est une énergie obtenue par transformation, contrairement à l'énergie primaire, qui désigne une énergie disponible dans l'environnement et sans transformation. Cette énergie est souvent plus facile à stocker, transporter et utiliser que les sources d'énergie primaire. C'est pour raison que les formes d'énergie secondaire sont appelée << vecteurs énergétiques >>. C'est le cas notamment de l'électricité, des carburants pétroliers raffinés (essence, gasoil) ou encore, à l'avenir, de l'hydrogène.

1.3.2 Le nombre de déplacement :

Le nombre de déplacements produits dans un spécimen dépendra du le niveau d'irradiation ou la densité de flux, le temps d'irradiation et le spectre d'énergie des neutrons. Une fois qu'un

atome déplacé est produit dans un matériau, la probabilité qu'il reste dépend de la le taux de production et le taux de recuit. Ceux-ci dépendront à leur tour de facteurs tels que la densité de flux et l'irradiation température. Ainsi mathématiquement, le dommage peut être représenté par :

$$D = F\{\phi_E(E), \ \sigma(E), T_I, T_A, t_I, t_A...\}$$
 (1.1)

οù

D est le paramètre d'endommagement considéré,

 $\phi_E(E)$ est le champ de rayonnement neutronique,

 $\sigma(E)$ est la section efficace de diffusion des neutrons,

 T_I est la température d'irradiation,

 T_A est la température de recuit,

 t_I est le temps d'irradiation,

 t_A est le temps de recuit.

Une fonction telle que l'équation (1.1) est beaucoup trop complexe pour être de toute utilisation réelle dans l'analyse des expériences de dommages causés par les rayonnements, et il faut donc faire des hypothèses simplificatrices. Le plus habituel la première consiste à supposer que les variables sont séparables, de sorte que le la production de déplacements dans un matériau peut être envisagée séparément de leur élimination par recuit etc [9].

Le pouvoir d'arrêt :

- Les interactions aboutissent à un **transfert d'énergie** de la particule aux électrons atomique et (dans une moindre mesure) aux noyaux de matière.
- L'énergie perdue par unité de longueur parcourue est défini par le pouvoir d'arrêt S

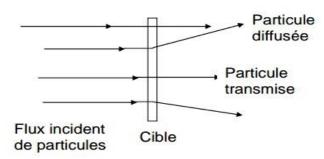
$$S = \frac{dE}{dl}$$

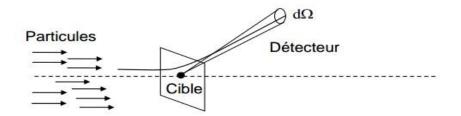
1.3.3 Section efficace de collision atomique

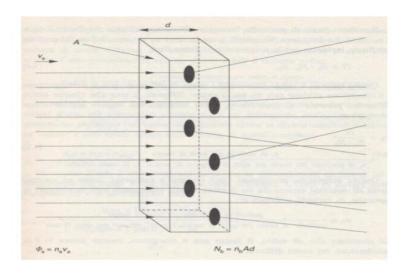
Définitions et notations

Pour explorer les propriétés du noyau on fait généralement des expériences de diffusion (collision) de particules d'un faisceau qu'on envoie sur une cible et on observe la diffusion << derrière >> la cible. Ce qui intéresse en général le physicien c'est la probabilité qu'une << réaction se produise >>. En fait la mesure consiste à faire un grand nombre de mesures entre un grand nombre de particules incidentes et un grand nombre de noyaux cible et de mesurer les particules diffusées par un

détecteur. On s'intéresse à la moyenne des valeurs mesurées. La probabilité qui nous intéresse c'est le rapport entre le taux d'interaction et de flux incident. Nous allons voir que cette probabilité qu'on appelle <u>section efficace</u> est indépendante des variables caractérisant le faisceau et la cible, c'est-à-dire l'intensité du faisceau et la géométrie et densité de la cible.







Section efficace:

La section efficace a pour but d'étudier la probabilité d'interaction entre les particules ou noyau d'un faisceau et la matière qui compose une cible. Unité de section efficace le barn, tel que :

$$1 \ barn = 10^{-24} cm^2 = 10^{-28} m^2 = 100 fm^2.$$

Le nombre de particules que l'on détecte est bien sur proportionnel au nombre de particules incidentes et au nombre de noyaux cible. La relation de proportionnalité s'exprime par l'intermédiaire d'un coefficient de proportionnalité σ .

La relation entre le <u>taux d'interaction</u> (T) (nombre de particules << diffusées>> par unité du temps) et la <u>section efficace</u> (σ) est alors

$$T = \sigma \Phi N_{cible} = \sigma \Phi s_{cible} S$$

avec

 Φ le <u>flux</u>, c'est-à-dire le nombre de particules incidentes par unité de surface et par unité du temps,

 N_{cible} le nombre de particules cible dans le volume de la cible correspondant à la surface (S) couverte par le faisceau,

 s_{cible} le nombre de particules cible par unité de surface (densité surfacique de particules).

CHAPITRE 02

Equation intégrale de VOLTERRA

2.1 Définitions

2.1.1 Equation intégrale

Soit D ent un ensemble fermé, borné et mesurable d'un espace Euclidien et X un espace de fonctions définies de D dans $\mathbb{K}(\mathbb{R}\ ou\ \mathbb{C})$, supposé être un espace de Banach. Une équation intégrale est un problème fonctionnel de la forme suivante :

Trouver $u \in X$; $\forall x \in D$,

$$h(x)u(x) = \int_{D} k(x,t,u(t))dt + f(x), \qquad (2.1)$$

où, f est une fonction dans X, $h:D\to \mathbb{K}$ qui n'est pas nécessairement dans X.

La fonction $k: D^2 \times \mathbb{K} \to \mathbb{K}$ est appelée le noyau de l'équation (2.1). Selon la forme de notre noyau k, l'équation peut être linéaire ou non linéaire. Dans le cas particulier ou le noyau k s'écrit sous la forme :

$$k(x,t,z) = g(x,t)z,$$

ou, $g: D^2 \to \mathbb{K}$, l'équation (2.1) est dit linéaire et cette nouvelle fonction g sera son noyau [10]. Dans le cas ou on ne peut pas séparer la troisième variable, notre équation est dite non linéaire et k tout entier définie son noyau.

Entre linéarité et non linéarité les études analytiques de (2.1) sont totalement différentes.

2.1.2 Equation Intégrale linéaire de Volterra

L'équation intégrale linéaire de Volterra est une équation de la forme

$$h(x)u(x) = f(x) + \int_{a}^{x} K(x,t)u(t)dt, \qquad a \le x, \ t \le b$$

$$a, b \in \mathbb{R}$$
(2.2)

Si f(x) = 0 l'équation (2.2) est dit homogène et elle est non homogène si $f(x) \neq 0$. La fonction h(x) détermine le type de l'équation intégrale : 1. Si h(x) = 0 l'équation intégrale de Volterra est de première espèce, elle s'écrit sous la forme

$$f(x) + \int_a^x K(x, t, u(t)) dt = 0$$

2. Si $h(x) = c(c \in \mathbb{R}^*)$ l'équation intégrale de Volterra est de seconde espèce, elle prend la forme

$$cu(x) = f(x) + \int_{a}^{x} K(x, t, u(t)) dt$$

2.1.3 Equation Intégrale non linéaire de Volterra

L'équation:

$$f(x) + \int_{a}^{x} K(x, t, u(t)) dt = 0$$

s'appelle équation intégrale non linéaire de Volterra de première espèce et l'équation

$$c u(x) = f(x) + \int_a^x K(x, t, u(t)) dt,$$
 $c \in \mathbb{R}^*$

est de seconde espèce.

2.2 Intégration Numérique

En analyse numérique, l'intégration numérique constitue une large famille d'algorithmes de calcul de la valeur numérique d'une certaine intégrale. L'objectif de l'intégration numérique est de calculer l'intégrale I(a, b) d'une fonction f(x) sur un certain intervalle [a, b] (figure 2.1).

$$I(a,b) = \int_a^b f(x) dx$$

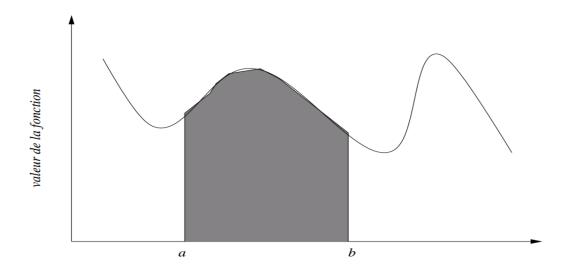


FIG. (2.1) L'intégrale d'une fonction sur [a, b] équivaut à la surface pleine

L'expression analytique de f(x) n'est pas toujours connue. On supposera ici que f(x) est connue sur (n+1) points dans l'intervalle [a,b] (n sous- intervalles $[x_i,x_{i+1}]$)

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$$

Il existe plusieurs raisons pour effectuer une intégration numérique. On cite par exemple le cas où le f(x) est connu seulement à certains points. D'autre part certaines applications informatiques peuvent avoir besoin d'intégration numérique et dans certains cas une formule pour l'intégrale peut être connu, mais il peut être difficile ou impossible de trouver une primitive qui est une fonction élémentaire. Un exemple d'une telle fonction à intégrer est $f(x) = exp(-x^2)$, dont les primitives ne peuvent pas être écrites dans une forme élémentaire. Il peut être possible de trouver une primitive symboliquement, mais il peut être plus facile à calculer une approximation numérique que de calculer la primitive. Il existe de nombreuses méthodes d'approximation d'une intégrale, on cite quelques-unes.

2.2.1 Quelque méthode de résolution approchés

1) Méthode du noyau dégénéré

On considère l'équation intégrale [2]

$$u(x) = f(x) + \int_{D} k(x,t)u(t)dt, \quad x \in D$$
 (2.3)

avec $D \subset \mathbb{R}^m$, $m \ge 1$ et X = C(D) muni de la norme $\|.\|_{\infty}$. Ou bien $X = L^2(D)$ muni d'un produit scalaire $\langle .,. \rangle$. L'opérateur intégral de (2.3) est supposé compact de X dans X.

On commence par une méthode classique très connue dans la résolution numérique des équations intégrales de second type, qui porte le nom méthode du noyau dégénéré, et elle est l'une des méthodes numériques les plus simples à définir et analyser. L'idée principale consiste à remplacer le noyau de l'équation intégrale par un noyau dégénéré, précisément on approxime le noyau k(x,t) de l'équation (2.3) par une suite de noyaux dégénéré,

$$k_n(x,t) = \sum_{i=1}^n a_i(x)b_i(t), \qquad n \ge 1$$

ou a_1, \ldots, a_n et b_1, \ldots, b_n sont des éléments de X, tels que a_1, \ldots, a_n sont linéairement indépendants.

Pour utiliser la méthode du noyau dégénéré on aura besoin du théorème suivante.

Théorème 2.1 Soient X et Y deux espaces de Banach et $A \in \mathcal{L}(X,Y)$ d'inverse borné A^{-1} . Soit $A_n \in \mathcal{L}(X,Y)$ une suite converge en norme vers A pour tout n tel que

$$||A^{-1}(A_n - A)|| < 1,$$

les opérateurs inverses $A_n^{-1}: Y \longrightarrow X$ existent et sont bornés par

$$||A_n^{-1}|| \le \frac{||A^{-1}||}{1 - ||A^{-1}(A_n - A)||}$$

et pour les solutions des équations

$$Au = f$$
 et $A_n u_n = f_n$

on a l'estimation de l'erreur suivante

$$||u_n - u|| \le \frac{||A^{-1}||}{1 - ||A^{-1}(A_n - A)||} \{ ||(A_n - A)u|| + ||f_n - f|| \}$$

Maintenant, on pose

$$Au(x) = \int_{D} k(x,t)u(t)dt$$
.

En tenant compte du théorème (2.1) appliqué aux opérateurs I-A et $I-A_n$, cette approximation devient plus efficace en terme de convergence, si elle est réalisée de sorte que l'opérateur intégral associé $A_n: X \to X$ défini par

$$A_n(u) = \sum_{i=1}^n (u, b_i) a_i,$$

satisfait la condition

$$\lim_{n\to\infty} ||A_n - A|| = 0$$

Sur C(D), muni de la norme de la convergence uniforme, cela signifie exactement

$$\max_{x \in D} \int_{D} |k_n(x,t) - k(x,t)| dt \to 0 \text{ quand } n \to \infty$$

Généralement, nous voulons que cette convergence soit rapide pour obtenir une convergence rapide de u_n vers la solution u, ou u_n est la solution approchée de l'équation approximante

$$u_n(x) = f(x) + \int_D k_n(x,t)u_n(t)dt,$$
 $x \in D$

Théorème 2.2 Dans [2] toute solution de l'équation

$$u_n = f + \sum_{i=1}^n \langle u_n, b_i \rangle a_i$$

s'écrit sous la forme

$$u_n = f + \sum_{j=1}^n c_j a_j$$

où les coefficients c_1, \ldots, c_n sont solutions du système

$$c_i - \sum_{j=1}^n c_j \langle a_j, b_i \rangle = \langle f, b_i \rangle, \qquad i = 1, \dots, n$$

Preuve. Pour plus détaille va voir [11].

2) Méthode d'approximations successives

On considère l'équation intégrale de Volterra de seconde espèce

$$u(x) = f(x) + \lambda \int_0^x k(x, t)u(t)dt$$

ou k(x,t) est un noyau continu, $k(x,t) \in C([a,b] \times [a,b])$.

Définition: la méthode d'approximation successives est définie par les intégrations suivantes

$$u_0(x) = f(x)$$

$$u_n(x) = \sum_{k=0}^n \lambda^n k^k f = \lambda k u_{n-1} + f$$

Lemme: $u(x) = \sum_{k=0}^{n} \lambda^{n} k^{k} f$ ou $k^{k} = \underbrace{k(k(\dots k))}_{k \text{ fois}}$

Théorème 2.3 l'équation intégrale de Volterra de seconde espèce

$$u(x) = f(x) + \lambda \int_0^x k(x, t) (t) dt$$

avec k(x,t) noyau continu et $\lambda \in \mathbb{R}$ admet une solution unique $u(x) \in \mathcal{C}([0,a])$ pour tout $f(x) \in \mathcal{C}([0,a])$.

Cette solution est donnée par un série de Neumann uniformément convergente

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^n(k^k f)(x)$$

et satisfait

$$||u(x)||_C \le ||f||_C \exp(|\lambda|Ma)$$

3) Intégration par interpolation

3.1) Interpolation polynomiale et splines

L'objectif est dans un premier temps de trouver une forme polynomiale passant par (n + 1) points. Cette forme sera définie sur le domaine entier ou par morceaux. On imposera alors selon le cas en plus de la continuité de la fonction, la continuité de sa dérivée et de ses dérivées successives [13].

3.1.1) Interpolation polynomiale

Supposons données (n + 1) points définis par les couples (x_i, y_i) , (i = 0, 1, ..., n). On démontre qu'il existe un seul polynôme de degré n:

$$P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n$$

vérifiant $P(x_i) = y_i$.

Interpolation de Lagrange

a) Interpolation linéaire

Supposons donnés deux points (x_0, y_0) et (x_1, y_1) . L'interpolation polynomiale de ces deux points est un polynôme de degré 1 qui correspond à la droite passant par les deux points. Ce polynôme est donné par

$$P(x) = y_0 + g(x)(y_1 - y_0)$$

avec

$$g(x) = \frac{x - x_0}{x - x_1} = \begin{cases} 0 & \text{si } x = x_0 \\ 1 & \text{si } x = x_1 \end{cases}$$

Que vaut le polynôme dans le cas général ou nous avons (n + 1) points (n > 1) [13].

b) Cas général

Supposons donnés (n + 1) points définis par les couples (x_i, y_i) , (i = 0,1,...,n). On commence par définir (n + 1) polynômes de degré n, $l_i(x)$ (i = 0,1,...,n) vérifiant

$$l_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & si & i = j \\ 0 & si & i \neq j \end{cases}$$

Il est facile de voir que ces polynômes sont donnés par

$$l_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Les (n + 1) polynômes $l_i(x)$ forment une base du sous-espace vectoriel des polynômes de degré n. En effet si

$$\lambda_0 l_0(x) + \lambda_1 l_1(x) + \dots + \lambda_n l_n(x) = 0$$

Alors

$$\lambda_0 l_0(x_k) + \lambda_1 l_1(x_k) + \ldots + \lambda_k l_k(x_k) + \ldots + \lambda_n l_n(x_k) = 0 \iff \lambda_k l_k(x_k) = 0$$

Ce qui entraine

$$\lambda_k = 0 \qquad (k = 0, 1, 2, \dots, n)$$

Exemple 2.1 Dans le cas n = 2, on obtient

$$l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \cdot \frac{x - x_2}{x_0 - x_2}$$

$$l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \cdot \frac{x - x_2}{x_1 - x_2}$$

$$l_2(x) = \frac{x - x_0}{x_2 - x_0} \cdot \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$

Ces polynômes apparaissent sur la figure 1 pour

$$x_0 = 0, x_1 = 1, x_2 = 2$$

$$l_0 = \frac{1}{2}x^2 - \frac{3}{2}x + 1$$

$$l_1 = -x^2 + 2x$$

$$l_2 = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}x$$

On vérifie alors que le polynôme

$$P(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i l_i(x)$$

est le polynôme d'interpolation puisqu'il est de degré n et qu'il vérifie $P(x_i) = y_i$ (i = 0,1,...,n). Ce polynôme est appelé polynôme d'interpolation de Lagrange .

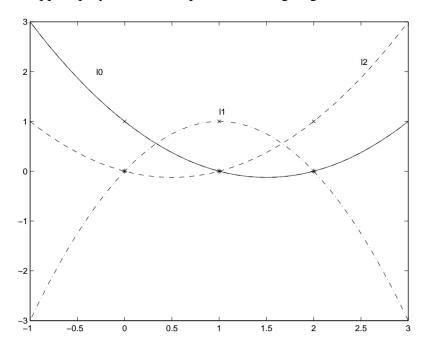


FIG. (2.2): Interpolation de Lagrange pour 3 points

c) Algorithme de calcul des coefficients

On démontre que le polynôme précédant peut s'écrire simplement :

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \prod_{j=0, j \neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \sum_{i=0}^{n} y_i \lambda_i^{(n)} \prod_{j=0, j \neq i}^{n} (x - x_j)$$

Les coefficients $\lambda_i^{(n)}$ peuvent se calculer de manière récursive en utilisant la formule suivante :

$$\lambda_i^{(n+1)} = \lambda_i^{(n)} / (x_i - x_j)$$
 $(i = 0, 1, ..., n)$

On peut montrer par ailleurs l'égalité suivante :

$$\sum_{i=0}^{n} \lambda_i^{(n)} = 0$$

Dans [13], l'algorithme de calcul des $\lambda_i^{(n)}$ peut se résumer de la manière suivante :

début
$$\lambda_0^{(0)}=1$$
 pour $k=1$ à n
$$pour \ i=0$$
 à $k=1$
$$\lambda_i^{(k)}=\lambda_i^{(k-1)}/(x_i-x_k)$$

$$fin$$

$$\lambda_k^{(k)}=-\sum_{i=0}^{k-1}\lambda_i^{(k)}$$

$$fin$$

Les coefficients a_i du polynôme $P_n(x)$ peuvent alors être déduits des coefficients $\lambda_i^{(n)}$.

Exemple 2.2 La figure (2.3) montre le polynome d'intégration de la fonction

$$f(x) = \log x - 2\frac{x-1}{x}$$

aux points [1,2,4,8,10]

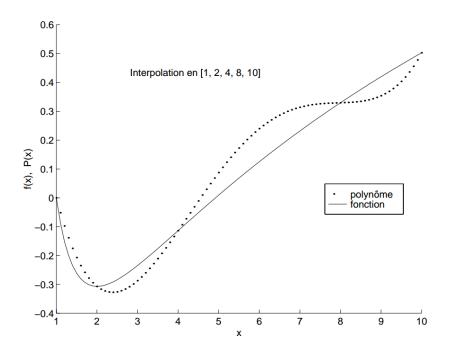


FIG. (2.3): Interpolation polynomiale

Remarque 1 Lorsqu'on détermine un polynôme d'interpolation, on espère que le polynôme approche encore la fonction en dehors du domaine d'interpolation (extrapolation). Mais ce n'est pas toujours le cas, on peut avoir une divergence rapide du polynôme par rapport à la fonction.

3.1.2) Interpolation par des splines

Lorsqu'on réalise une interpolation, on espère généralement que l'interpolation marche encore en dehors des points pris en compte pour calculer le polynôme. Or comme cela a été remarqué précédemment, l'interpolation polynomiale diverge rapidement en dehors des points d'interpolation. De plus, l'utilisation de polynômes de degré élevé est à éviter puisqu'on introduit rapidement des instabilités numériques.

On préfère alors une interpolation polynomiale par morceaux appelée spline. La spline peut changer de forme aux points (x_i, y_i) appelés noeuds.

Définition 1. Etant donnés (n + 1) points (x_i, y_i) , la spline S(x) est définie par

$$S(x) = \begin{cases} S_0(x), & x \in [x_0, x_1] \\ S_1(x), & x \in [x_1, x_2] \\ \vdots & \vdots \\ S_{n-1}(x), & x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases}$$

Lorsque les polynômes $S_i(x)$ sont de degré 1, on parle de spline linéaire ; quand ils sont de degré 2, on parle de spline quadratique. S'ils sont de degré 3, on parle de spline cubique.

Fonctions splines polynomiale

a) Splines linéaires :

Etant donnés (n + 1) points (x_i, y_i) , on cherche une spline linéaire S(x) de la forme

$$S(x) = \begin{cases} S_0(x) = a_0 x + b_0, & x \in [x_0, x_1] \\ S_1(x) = a_1 x + b_1, & x \in [x_1, x_2] \\ \vdots \\ S_{n-1}(x) = a_{n-1} x + b_{n-1}, & x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases}$$

vérifiant la condition d'interpolation

$$S(x_i) = y_i$$

La détermination de S(x) nécessite le calcul de 2n coefficients a_i et b_i , $(i=0,1,\ldots,n-1)$. Pour cela on dispose de 2n équations :

-(n+1) équations d'interpolation $(i=0,1,\ldots,n)$

$$S_i(x_i) = y_i$$
$$y_i = a_i x_i + b_i$$

-(n-1) équations de continuité de la spline $(i=0,1,\ldots,n-2)$

$$S_i(x_{i+1}) = S_{i+1}(x_{i+1})$$
 $(i = 0,1,...,n-2)$
 $a_i x_{i+1} + b_i = y_{i+1}$

On en déduit donc de manière unique

$$a_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}, \quad (i = 0, 1, ..., n - 1)$$

$$b_i = y_i - a_i x_i$$
, $(i = 0,1,...,n-1)$

b) Splines quadratique

Nous avons vu précédemment que la spline linéaire ne permettait d'assurer que la continuité de la fonction S(x). Si on veut que S(x) soit continuement dérivable, il faut donc choisir des polynômes $S_i(x)$ de degré au moins égal à 2.

Définition 2 Supposons donnés (n + 1) points définis par les couples (x_i, y_i) ,

(i = 0,1,...,n). L'interpolation par des splines quadratiques équivaut à l'approximation sur chaque intervalle $[x_i, x_{i+1}]$ par un polynôme du second degré. On impose aux différents points la continuité des valeurs des polynômes et de leurs dérivées.

$$S(x) = \begin{cases} S_0(x) = a_0 x^2 + b_0 x + c_0 \\ S_1(x) = a_1 x^2 + b_1 x + c_1 \\ \vdots \\ S_{n-1}(x) = a_{n-1} x^2 + b_{n-1} x + c_{n-1} \end{cases}$$

Exemple 2.3 La fonction

$$f(x) = \begin{cases} x^2 & x \le 0 \\ -x^2 & 0 \le x \le 1 \\ 1 - 2x & x > 1 \end{cases}$$

représente une spline quadratique. En effet :

- _ elle est définie sur] $-\infty$, + ∞ [
- _ elle est continue sur $]-\infty, +\infty[$
- _ sa dérivée est continue sur $]-\infty, +\infty[$
 - $f'(0^-) = f'(0^+) = 0$
 - $f'(1^-) = f'(1^+) = -2$

La spline S(x) est-elle unique ? La détermination de S(x) nécessite le calcule des 3n coefficients a_i et b_i , $(i=0,1,\ldots,n-1)$. Pour cela on dispose seulement de (3n-1) équations :

-(n+1) équations d'interpolation (i=0,1,...,n)

$$S_i(x_i) = y_i$$

$$y_i = a_i x_i^2 + b_i x_i + c_i$$

-(n-1) équations de continuité de la spline

$$S_i(x_{i+1}) = S_{i+1}(x_{i+1})$$
 $(i = 0,1,...,n-2)$

-(n-1) équations de continuité de sa dérivée

$$S'_{i}(x_{i+1}) = S'_{i}(x_{i+1})$$
 $(i = 0,1,...,n-2)$

Pour pouvoir résoudre le problème, il est donc nécessaire de fixer une condition supplémentaire.

Pour cela définissons la variable auxiliaire $z_i = S'(x_i)$, (i = 0,1,...,n) et récrivons $S_i(x)$ sous la forme

$$S_i(x) = a_i(x - x_i)^2 + b_i(x - x_i) + c_i$$

Des conditions d'interpolation, il apparait clairement que, sous cette forme, les c_i sont déterminés de manière unique

$$c_i = S_i(x_i) = y_i$$
 $(i = 0, 1, ..., n - 2)$

De plus, par définition

$$S_i'(x_i) = b_i = z_i \tag{2.4}$$

Ce qui détermine les b_i . En écrivant maintenant les conditions de continuité de la dérivée, on obtient

$$2a_i(x_{i+1}-x_i)+b_i=2a_{i+1}(x_{i+1}-x_{i+1})+b_{i+1} \quad (i=0,1,\ldots,n-2)$$

En utilisant (2.4), on obtient les a_i

$$a_i = \frac{z_{i+1} - z_i}{2(x_{i+1} - x_i)}$$

 $S_i(x)$ se met donc sous la forme

$$S_i(x) = \frac{z_{i+1} - z_i}{2(x_{i+1} - x_i)} (x - x_i)^2 + z_i(x - x_i) + y_i$$

Il ne reste plus qu'à calculer les z_i . Pour cela on écrit les équations de continuité de la spline au point x_{i+1}

$$S_{i}(x) = \frac{z_{i+1} - z_{i}}{2(x_{i+1} - x_{i})} (x_{i+1} - x_{i})^{2} + z_{i}(x_{i+1} - x_{i}) + y_{i}$$

$$= \frac{z_{i+1} - z_{i}}{2} (x_{i+1} - x_{i}) + z_{i}(x_{i+1} - x_{i}) + y_{i}$$

$$= y_{i+1}$$

On en déduit donc que

$$z_{i+1} = 2\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} - z_i$$
 $(i = 0, 1, ..., n - 1)$

et on voit apparaître naturellement la condition supplémentaire qui sera ici une condition d'initialisation de la récurrence sur les z_i . On doit donc choisir

$$z_0 = S_0'(x_0)$$

Remarque 2 On peut donner n'importe quelle valeur à z_0 , mais généralement on choisit $z_0 = 0$. Notons qu'au lieu de fixer z_0 , on aurait pu fixer z_n et faire une récurrence descendante. La figure (2.5) montre que le fait d'ajouter le point 0 dans la figure (2.4) améliore les résultats au voisinage de 0 mais dégrade le résultats sur l'intervalle [2,5]. On observe en effet des oscillations de forte amplitude.

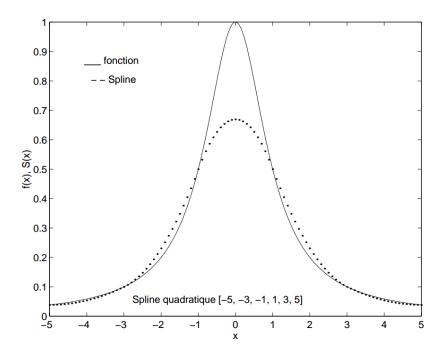


FIG. (2.4): Spline quadratique aux points [-5, -3, -1, 1, 3, 5]

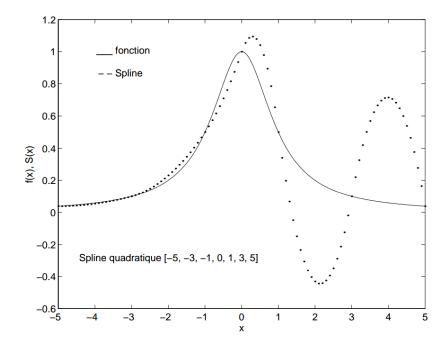


FIG. (2.5): Spline quadratique aux points [-5, -3, -1, 0, 1, 3, 5]

c) Splines cubique:

L'interpolation par des splines cubiques (polynômes de degré 3) entraine la continuité de la spline, de sa dérivée et de la dérivée seconde. Définissons $y_i'' = S''(x_i)$, et écrivons $S_i(x)$ sous la form

$$S_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i$$

Ayant 4n coefficients à déterminer, nous ne disposons cette fois-ci que de (4n-1) équations ; les (3n-1) conditions identiques à celles de la spline quadratique et les (n-1) conditions supplémentaire de continuité de la dérivée seconde. Il faut donc fixer deux conditions supplémentaires. On impose généralement les valeurs des dérivées secondes aux points x_0 et x_n .

$$y_0^{\prime\prime} = S_0(x_0)$$

et

$$y_n^{\prime\prime} = S_{n-1}(x_n)$$

Les conditions d'interpolation aux points x_i donnent

$$d_i = y_i$$

Les conditions de continuité de la dérivée et de la dérivée seconde entrainent

$$a_{i} = \frac{1}{6h_{i}} (y_{i+1}'' - y_{i}'')$$

$$b_{i} = \frac{1}{2} y_{i}''$$

$$c_{i} = \frac{1}{h_{i}} (y_{i+1} - y_{i}) - \frac{1}{6} h_{i} (y_{i+1}'' + 2y_{i}'')$$

avec

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

Il suffit donc maintenant de calculer les y_i'' , (i = 0,1,...,n-2).

L'écriture de la continuité de la spline en utilisant les égalités précédentes donne le système d'équations à (n-2) inconnues permettant d'obtenir les ψ_i'' ,

$$(t=0,1,\ldots,n-2)$$

 $(t=0,1,\ldots,n-2)$

$$\begin{bmatrix} y''(1) \\ y''(2) \\ y''(3) \\ \vdots \\ y''(n-2) \\ y''(n-1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{6}{h_0}(y_1 - y_0) + \frac{6}{h_1}(y_2 - y_1) - h_0y_0'' \\ -\frac{6}{h_1}(y_2 - y_1) + \frac{6}{h_2}(y_3 - y_2) \\ -\frac{6}{h_2}(y_3 - y_2) + \frac{6}{h_3}(y_4 - y_3) \\ \vdots \\ -\frac{6}{h_{n-3}}(y_{n-2} - y_{n-3}) + \frac{6}{h_{n-2}}(y_{n-1} - y_{n-2}) \\ -\frac{6}{h_{n-2}}(y_{n-1} - y_{n-2}) + \frac{6}{h_{n-1}}(y_n - y_{n-1}) - h_{n-1}y_n'' \end{bmatrix}$$

La figure ci dessus est une exemple de spline cubique.

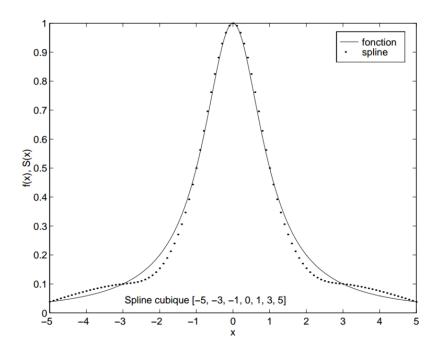


FIG. (2.6) : Spline cubique aux points [-5, -3, -1, 0, 1, 3, 5]

On remarque que les oscillations dont très réduites par rapport à l'interpolation polynomiale.

Remarque 3 quand on choisit

$$y_0^{\prime\prime} = y_n^{\prime\prime} = 0$$

la spline cubique est dite naturelle.

Théorème : (Optimalité de la spline cubique naturelle) Soit f une fonction C^2 sur l'intervalle [a,b], et soit (n+1) points

$$a = x_0, x_1, \ldots, x_n = b$$

et

$$f(a) = \psi_0, \psi_1, \dots, \psi_n = f(b)$$

alors la spline cubique naturelle S(x) qui réalise l'interpolation de f aux points (x_i, y_i) vérifie

$$\int_{a}^{b} [S''(x)]^{2} dx \le \int_{a}^{b} [f''(x)]^{2} dx$$

En d'autres termes, la courbure moyenne de S est inférieure à celle de f.

Fonctions splines non polynômiales [12]:

On appelle spline non polynômiale d'ordre *n* tout fonction de la forme

$$S_i(t) = a_i \cos l(t - t_i) + b_i \sin l(t - t_i) + \dots + y_i (t - t_i)^{n-1} + z_i, \quad i = 0, \dots, n$$
 (2.5)

ou a_i , b_i , y_i et z_i sont des coefficients l est la fréquence des fonctions trigonométrique.

a) Fonction spline linéaire non polynomiale :

une fonction spline linéaire non polynomiale s'écrit sous la forme :

$$P_i(t) = a_i \cos l(t - t_i) + b_i \sin l(t - t_i) + c_i(t - t_i) + d_i, \qquad i = 0, ..., n$$
(2.6)

ou a_i, b_i, c_i et d_i sont des constantes déterminer par la dérivation de l'équation (2.6) trois fois par rapport à t, on obtient :

$$P'_{i}(t) = -la_{i} \sin l(t - t_{i}) + lb_{i} \cos l(t - t_{i}) + c_{i}$$

$$P''_{i}(t) = -l^{2} a_{i} \cos l(t - t_{i}) - l^{2} b_{i} \sin l(t - t_{i})$$

$$P'''_{i}(t) = l^{3} a_{i} \sin l(t - t_{i}) - l^{3} b_{i} \cos l(t - t_{i})$$

$$(2.7)$$

on remplacer t par t_i dans (2.6) et (2.7), on trouve

$$\begin{cases}
P_{i}(t_{i}) = a_{i} + d_{i} \\
P'_{i}(t_{i}) = lb_{i} + c_{i} \\
P''_{i}(t_{i}) = -l^{2}a_{i} \\
P'''_{i}(t_{i}) = -l^{3}b_{i}
\end{cases} (2.8)$$

donc a partir des équations (2.8), les valeurs de a_i , b_i , c_i et d_i sont

$$a_{i} = -\frac{1}{l^{2}} P_{i}^{"}(t_{i})$$

$$b_{i} = -\frac{1}{l^{3}} P_{i}^{"'}(t_{i})$$

$$c_{i} = P_{i}^{'}(t_{i}) - lb_{i}$$

$$d_{i} = P_{i}(t_{i}) - a_{i}$$

$$(2.9)$$

b) Fonction spline quadratique non-polynomiale:

La fonction spline quadratique non-polynomiale est définie par :

$$Q_i(t) = a_i \cos l(t - t_i) + b_i \sin l(t - t_i) + c_i(t - t_i) + d_i(t - t_i)^2 + e_i, \quad i = 0, 1, \dots, n$$
 (2.10)

ou $a_i, b_i, c_i, et e_i$ sont des constante déterminer a partir la dérivation de la fonction

(2.10) quatre fois par rapport à t, on obtient

$$Q_{i}'(t) = -la_{i} \sin l(t - t_{i}) + lb_{i} \cos l(t - t_{i}) + c_{i} + 2d_{i} (t - t_{i})$$

$$Q_{i}''(t) = -l^{2} a_{i} \cos l(t - t_{i}) - l^{2} b_{i} \sin l(t - t_{i}) + 2d_{i}$$

$$Q_{i}'''(t) = l^{3} a_{i} \sin l(t - t_{i}) - l^{3} b_{i} \cos l(t - t_{i})$$

$$Q_{i}^{(4)}(t) = l^{4} a_{i} \cos l(t - t_{i}) + l^{4} b_{i} \sin l(t - t_{i})$$

$$(2.11)$$

On remplace t par t_i dans les relations (2.10) et (2.11), on trouve

$$\begin{cases}
Q_{i}(t_{i}) = a_{i} + e_{i} \\
Q'_{i}(t_{i}) = lb_{i} + c_{i} \\
Q''_{i}(t_{i}) = -l^{2}a_{i} + 2d_{i} \\
Q'''_{i}(t_{i}) = -l^{3}b_{i} \\
Q_{i}^{(4)}(t_{i}) = l^{4}a_{i}
\end{cases} (2.12)$$

A partir des équations (2.12), on détermine les valeurs des constantes précédentes

$$a_{i} = \frac{1}{l^{4}} Q_{i}^{(4)}(t_{i})$$

$$b_{i} = -\frac{1}{l^{3}} Q_{i}^{(\prime\prime\prime}(t_{i})$$

$$c_{i} = Q_{i}^{\prime}(t_{i}) - lb_{i}$$

$$d_{i} = \frac{1}{2} (Q_{i}^{\prime\prime}(t_{i}) + l^{2}a_{i})$$

$$e_{i} = Q_{i}(t_{i}) - a_{i}$$

$$(2.13)$$

c) Fonction spline cubique non-polynomiale:

On définit la fonction spline cubique non-polynomiale comme suit :

$$S_i(t) = a_i \cos l(t - t_i) + b_i \sin l(t - t_i) + c_i(t - t_i) + d_i(t - t_i)^2 + e_i (t - t_i)^3 + m_i,$$

$$i = 0, \dots, n$$
(2.14)

Ou a_i, b_i, c_i, d_i, e_i et m_i sont des constantes à évaluer. Nous différencions l'équation (2.14) cinq fois par rapport à t, on obtient

$$S'_{i}(t) = -la_{i} \sin l(t - t_{i}) + lb_{i} \cos l(t - t_{i}) + c_{i} + 2d_{i}(t - t_{i}) + 3e_{i}(t - t_{i})^{2}$$

$$S''_{i}(t) = -l^{2}a_{i} \cos l(t - t_{i}) - l^{2}b_{i} \sin l(t - t_{i}) + 2d_{i} + 6e_{i}(t - t_{i})$$

$$S'''_{i}(t) = l^{3}a_{i} \sin l(t - t_{i}) - l^{3}b_{i} \cos l(t - t_{i}) + 6e_{i}$$

$$S''_{i}(t) = l^{4}a_{i} \cos l(t - t_{i}) + l^{4}b_{i} \sin l(t - t_{i})$$

$$S''_{i}(t) = -l^{5}a_{i} \sin l(t - t_{i}) + l^{5}b_{i} \cos l(t - t_{i})$$

$$(2.15)$$

Par conséquent, remplacer t par t_i dans les relations (2.14) et (2.15)

$$S_{i}(t_{i}) = a_{i} + m_{i}$$

$$S'_{i}(t_{i}) = lb_{i} + c_{i}$$

$$S''_{i}(t_{i}) = -l^{2}a_{i} + 2d_{i}$$

$$S'''_{i}(t_{i}) = -l^{3}b_{i} + 6e_{i}$$

$$S_{i}^{(4)}(t_{i}) = l^{4}a_{i}$$

$$S_{i}^{(5)}(t_{i}) = l^{5}b_{i}$$

$$(2.16)$$

Alors les valeurs de a_i , b_i , c_i , d_i , e_i et m_i sont :

$$a_{i} = \frac{1}{l^{4}} S_{i}^{(4)}(t_{i})$$

$$b_{i} = \frac{1}{l^{5}} S_{i}^{(5)}(t_{i})$$

$$c_{i} = S_{i}'(t_{i}) - lb_{i}$$

$$d_{i} = \frac{1}{2} (S_{i}''(t_{i}) + l^{2}a_{i})$$

$$e_{i} = \frac{1}{6} (S_{i}'''(t_{i}) + l^{3}b_{i})$$

$$m_{i} = S_{i}(t_{i}) - a_{i}$$

$$pour i = 0, 1, ..., n.$$

$$(2.17)$$

2.3 Application : Résolution Numérique de Equation Intégral linéaire de Volterra par spline non polynomiale [12], [17]

On considère l'équation intégral linéaire de Volterra de deuxième espèce

$$u(x) = f(x) + \int_{a}^{x} k(x, t) u(t) dt, \qquad x \in [a, b]$$
 (2.18)

nous allons donner les schémas des fonctions splines non polynomiales linéaire, quadratique et cubique pour trouver la solution de l'équation (2.18).

Pour trouver la solution on va différencier l'équation (2.18) cinq fois par rapport à x, en utilisant la formule de Leibniz, nous réalisons :

$$u''(x) = f'(x) + \int_{a}^{x} \frac{\partial k(x,t)}{\partial x} u(t) dt + k(x,x) u(x)$$

$$u'''(x) = f''(x) + \int_{a}^{x} \frac{\partial^{2} k(x,t)}{\partial x^{2}} u(t) dt + \left(\frac{k(x,t)}{x}\right)_{t=x} u(x)$$

$$+ \frac{dk(x,x)}{dx} u(x) + k(x,x) u'(x)$$

$$(2.20)$$

$$u'''(x) = f'''(x) + \int_{a}^{x} \frac{\partial^{3} k(x,t)}{\partial x^{3}} u(t) dt + \left(\frac{\partial^{2} k(x,t)}{\partial x^{2}}\right)_{t=x} u(x)$$

$$+ \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x}\right)_{t=x} u(x) + \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x}\right)_{t=x} u'(x)$$

$$+ \frac{d^{2} k(x,x)}{dx^{2}} u(x) + 2 \frac{dk(x,x)}{dx} u'(x) + k(x,x) u''(x)$$

$$u^{(4)}(x) = f^{(4)}(x) + \int_{a}^{x} \frac{\partial^{4} k(x,t)}{\partial x^{4}} u(t) dt + \left(\frac{\partial^{3} k(x,t)}{\partial x^{3}}\right)_{t=x} u(x)$$

$$+ \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial^{2} k(x,t)}{\partial x^{2}}\right)_{t=x} u(x) + \left(\frac{\partial^{2} k(x,t)}{\partial x^{2}}\right)_{t=x} u'(x)$$

$$+ \frac{d^{2}}{dx^{2}} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} u(x) + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial^{2}k(x,t)}{\partial x^{2}} \right)_{t=x} u'(x)$$

$$+ \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} u'(x) + \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} u''(x) + \frac{d^{3}k(x,x)}{dx^{3}} u(x)$$

$$+ 3 \frac{d^{2}k(x,x)}{dx^{2}} u'(x) + 3 \frac{dk(x,x)}{dx} u''(x) + k(x,x)u'''(x)$$

$$+ 2 \frac{d^{2}k(x,t)}{dx^{2}} u'(x) + 3 \frac{d^{2}k(x,t)}{dx^{3}} u(t) dt + \left(\frac{\partial^{4}k(x,t)}{\partial x^{4}} \right)_{t=x} u(x)$$

$$+ \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial^{3}k(x,t)}{\partial x^{3}} \right)_{t=x} u(x) + \left(\frac{\partial^{3}k(x,t)}{\partial x^{3}} \right)_{t=x} u'(x)$$

$$+ \frac{d^{2}}{dx^{2}} \left(\frac{\partial^{2}k(x,t)}{\partial x^{2}} \right)_{t=x} u(x) + 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial^{2}k(x,t)}{\partial x^{2}} \right)_{t=x} u'(x)$$

$$+ \left(\frac{\partial^{2}k(x,t)}{\partial x^{2}} \right)_{t=x} u''(x) + \frac{d^{3}}{dx^{3}} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} u'(x)$$

$$+ 3 \frac{d^{2}}{dx^{2}} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} u'(x) + 3 \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} u''(x)$$

$$+ \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} u'''(x) + \frac{d^{4}k(x,t)}{dx^{4}} u(x) + 4 \frac{d^{3}k(x,t)}{dx^{3}} u'(x)$$

$$+ 6 \frac{d^{2}k(x,x)}{dx^{2}} u'''(x) + 4 \frac{d^{4}k(x,x)}{dx} u'''(x) + k(x,x)u^{(4)}(x)$$

$$(2.23)$$

Pour compléter notre procédure de résolution équation intégrale de Volterra, on substitue x=a dans les équations (2.18)-(2.23), alors on obtient :

$$u(a) = f(a) \tag{2.24}$$

$$u'(a) = f'(a) + k(a, a)u(a)$$
(2.25)

$$u''(a) = f''(a) + \left(\left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x}\right)_{t=x}\right)_{x=a} u(a) + \left(\frac{dk(x,x)}{dx}\right)_{x=a} u(a)$$

$$+k(a,a)u'(a) \tag{2.26}$$

$$u'''(a) = f'''(a) + \left(\left(\frac{\partial k^2(x,t)}{\partial x^2}\right)_{t=x}\right)_{x=a} u(a) + \left(\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x}\right)_{t=x}\right)_{x=a} u(a) + \left(\left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x}\right)_{t=x}\right)_{x=a} u(a) + \left(\left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x}\right)_{t=x}\right)_{x=a} u(a) + \left(\left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x}\right)_{t=x}\right)_{x=a} u(a) + 2\left(\frac{\partial k(x,x)}{\partial x}\right)_{x=a} u'(a) + k(a,a)u''(a)$$

$$(2.27)$$

$$u^{(4)}(a) = f^{(4)}(a) + \left(\left(\frac{\partial k^3(x,t)}{\partial x^3}\right)_{t=x}\right)_{x=a} u(a) + \left(\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial^2 k(x,t)}{\partial x^2}\right)_{t=x}\right)_{x=a} u(a)$$

$$+ \left(\left(\frac{\partial^{2}k(x,t)}{\partial x^{2}} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u'(a) + \left(\frac{d^{2}}{dx^{2}} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u(a)$$

$$+ \left(\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial^{2}k(x,t)}{\partial x^{2}} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u'(a) + \left(\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u'(a)$$

$$+ \left(\left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u''(a) + \left(\frac{d^{3}k(x,x)}{dx^{3}} \right)_{x=a} u(a)$$

$$+ 3 \left(\frac{d^{2}k(x,x)}{dx^{2}} \right)_{x=a} u'(a) + 3 \left(\frac{dk(x,x)}{dx} \right)_{x=a} u''(a) + k(a,a)u'''(a)$$

$$+ 3 \left(\frac{\partial^{2}k(x,t)}{\partial x^{2}} \right)_{x=a} u'(a) + \left(\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial^{3}k(x,t)}{\partial x^{3}} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u(a)$$

$$+ \left(\left(\frac{\partial^{3}k(x,t)}{\partial x^{3}} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u'(a) + \left(\frac{d^{2}}{dx^{2}} \left(\frac{\partial^{2}k(x,t)}{\partial x^{2}} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u'(a)$$

$$+ 2 \left(\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial^{2}k(x,t)}{\partial x^{2}} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u'(a) + 3 \left(\frac{d^{2}k(x,t)}{\partial x^{2}} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u'(a)$$

$$+ \left(\frac{d^{3}}{dx^{3}} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u(a) + 3 \left(\frac{d^{2}}{dx^{2}} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u''(a)$$

$$+ 3 \left(\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u''(a) + \left(\left(\frac{\partial k(x,t)}{\partial x} \right)_{t=x} \right)_{x=a} u'''(a)$$

$$+ \left(\frac{d^{4}k(x,x)}{dx^{4}} \right)_{x=a} u(a) + 4 \left(\frac{d^{3}k(x,x)}{dx^{3}} \right)_{x=a} u'(a) + 6 \left(\frac{d^{2}k(x,x)}{dx^{2}} \right)_{x=a} u'''(a)$$

$$+ 4 \left(\frac{d^{4}k(x,x)}{dx} \right)_{x=a} u'''(a) + k(x,x)u^{(4)}(a)$$

$$(2.29)$$

Maintenant, nous essayons de résoudre l'équation (2.18) en utilisant des fonctions splines non polynomiales linéaires, quadratiques et cubiques.

2.3.1 Le schéma de la fonction spline linéaire non polynomiale

Nous approchons la solution des équations intégrales linéaires de Volterra (2.18) en utilisant la fonction spline linéaire non polynomiale (2.6). Nous introduisons la méthode de la solution par l'algorithme.

Algorithme (2.3.1)

Etape 1: Définir
$$h = \frac{(b-a)}{n}$$
, $t_i = t_0 + ih$, $i = 0, ..., n$ (ou $t_0 = a, t_n = b$) et $u_0 = f(a)$.

Etape 2: Evaluez a_0 , b_0 , c_0 et d_0 en substituant (2.24) - (2.27) aux équations (2.9).

Etape 3: Calculez $p_0(t)$ en utilisant l'étape2 et l'équation (2.6).

Etape 4: Rapprocher $u_1 = p_0(t_1)$.

Etape 5: Pour i = 1 à n - 1, procéder comme suit:

Etape 6: Evaluez a_i, b_i, c_i , et d_i en utilisant les équations (2.9) et en remplacant $u(t_i)$,

$$u'(t_i), u''(t_i)$$
 et $u'''(t_i)$ par $p_i(t_i), p_i'(t_i), p_i''(t_i)$ et $p_i'''(t_i)$.

Etape 7: Calculez $p_i(t)$ en utilisant l'étape 6 et l'équation (2.6).

Etape 8: rapprocher $u_i = p_i(t_{i+1})$.

2.3.2 Le schéma de la fonction spline quadratique non polynomiale

Afin d'approcher la solution de El linéaires de Volterra (2.18) en utilisant une fonction spline quadratique non polynomiale (2.10). Nous présentons une méthode de solution par l'algorithme.

Algorithme (2.3.2)

Etape 1: Définir
$$h = \frac{(b-a)}{n}$$
, $t_i = t_0 + ih$, $i = 0, ..., n$ (ou $t_0 = a, t_n = b$) et $u_0 = f(a)$.

Etape 2: Evaluez a_0 , b_0 , c_0 et d_0 en substituant (2.24) - (2.28) aux équations (2.13).

Etape 3: Calculez $Q_0(t)$ en utilisant l'étape2 et l'équation (2.10).

Etape 4: Rapprocher $u_1 = Q_0(t_1)$.

Etape 5: Pour i = 1 à n - 1, procéder comme suit:

Etape 6: Evaluez a_i , b_i , c_i , et d_i en utilisant les équations (2.13) et en remplacant $u(t_i)$,

$$u'(t_i), u''(t_i)$$
 et $u'''(t_i)$ par $Q_i(t_i), Q_i'(t_i), Q_i''(t_i)$ et $Q_i'''(t_i)$.

Etape 7: Calculez $Q_i(t)$ en utilisant l'étape 6 et l'équation (2.13).

Etape 8: rapprocher $u_i = Q_i(t_{i+1})$

2.3.3 Le schéma de la fonction spline cubique non polynomiale

Nous approchons la solution des El linéaires de Volterra (2.18) en utilisant la fonction spline cubique non polynomiale (2.14). Nous introduisons la méthode de la solution par l'algorithme.

Algorithme (2.3.3)

Etape 1: Définir
$$h = \frac{(b-a)}{n}$$
, $t_i = t_0 + ih$, $i = 0, ..., n$ (ou $t_0 = a, t_n = b$) et $u_0 = f(a)$.

Etape 2: Evaluez a_0 , b_0 , c_0 et d_0 en substituant (2.24) - (2.29) aux équations (2.17).

Etape 3: Calculez $S_0(t)$ en utilisant l'étape2 et l'équation (2.14).

Etape 4: Rapprocher $u_1 = S_0(t_1)$.

Etape 5: Pour i = 1 à n - 1, procéder comme suit:

Etape 6: Evaluez a_i, b_i, c_i , et d_i en utilisant les équations (2.17) et en remplacant $u(t_i)$, $u'(t_i), u''(t_i)$ et $u'''(t_i)$ par $S_i(t_i), S_i'(t_i), S_i''(t_i)$ et $S_i'''(t_i)$.

Etape 7: Calculez $S_i(t)$ en utilisant l'étape 6 et l'équation (2.17).

Etape 8: rapprocher $u_i = S_i(t_{i+1})$.

Exemple 2.4

On considère l'équation intégrale de Volterra de deuxième espèce

$$u(x) = 1 + \int_{a}^{x} e^{t-x} u(t) dt, \qquad 0 \le x \le 1$$

telle que la solution exacte est u(x) = x + 1.

Les deux tableaux (1) et (2) présentent une comparaison entre les erreures dans nos méthodes

| x | erreur SNPL | erreur SNPQ | erreur SNPC |
|-----|----------------------|----------------------|----------------------|
| 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0.2 | 2.2204e - 16 | 2.2204e - 16 | 2.2204e - 16 |
| 0.4 | 4.4409e – 16 | 4.4409e – 16 | 4.4409e – 16 |
| 0.6 | 4.4409e – 16 | 4.4409e – 16 | 4.4409e – 16 |
| 0.8 | 6.6613e – 16 | 6.6613e – 16 | 6.6613e – 16 |
| 1 | 8.8818 <i>e</i> – 16 | 8.8818 <i>e</i> – 16 | 8.8818 <i>e</i> – 16 |

Tableau (2.1): les erreurs pour h = 0.1

| \boldsymbol{x} | erreur SNPL | erreur SNPQ | erreur SNPC |
|------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0.2 | 6.6613e – 16 | 6.6613 <i>e</i> – 16 | 6.6613e – 16 |
| 0.4 | 1.3323 <i>e</i> – 15 | 1.3323e – 15 | 1.3323e – 15 |
| 0.6 | 2.2204e - 15 | 2.2204e - 15 | 2.2204e - 15 |
| 0.8 | 2.8866e – 15 | 2.8866 <i>e</i> – 15 | 2.8866e - 15 |
| 1 | 3.5527 <i>e</i> – 15 | 3.5527 <i>e</i> – 15 | 3.5527 <i>e</i> – 15 |

Tableau (2.2): les erreurs pour h = 0.025

CHAPITRE 03

Equation intégrale de la théorie statistique

des dommages

Introduction

Les développements récents obtenus dans les performances des machines à fusion ont conduit les principaux organismes de recherches à porter leur attention sur les aspects technologique des matériaux de cette filière. Les spécifications de tenue à l'irradiation, de même que pour les réacteurs à fission, sont exprimées en fluences de dommages "fin-de-vie", généralement en nombre de déplacements par atome (d. p. a). Dans le cas des métaux (ou acier), on détermine le nombre de (d. p. a) par la connaissance du flux et du spectre de neutrons, pondéré par une section efficace de création de dommage. On se propose de déterminer le nombre de collisions dans un solide polyatomique où on considère que chaque atome primaire "i" d'énergie E peut déplacer un atome secondaire de type "j" soit directement soit après avoir choqué un atome de type "k".

Le calcul de l'énergie déposée sous forme de dommage dans un solide monoatomique bombardé par des ions de haute énergie à été résolu depuis longtemps par Lindhard [7], [6]. Le passage de cette énergie de dommage au nombre de déplacement (d. p. a) a été fait par Robinson [15]. Malheureusement, dans un compose poly-atomiques l'opération n'est pas simple, pour des raisons Liées à l'énergie des atomes et à son déplacement. En effet dans un composé poly-atomique la partition de l'énergie de dommage entre les devers types d'atomes ne peut se calculer simplement c'est ce qui a été démontre en [20], de plus les énergies de seuil de déplacement peuvent différer d'un type d'atome à l'autre. D'autre part, une cascade de déplacement initiée par un atome de nature donnée se développe en mettant en jeu les autres types d'atomes.

Une solution analytique a été dans de [3]. Dans le cas le plus simple d'irradiations par des particules de faible énergie où l'on peut négliger le ralentissement électronique.

Dans le cas général où il faut tenir compte du freinage électronique des ions en mouvement les auteurs dans [1]. Dans cette référence les auteurs ont calculer directement le nombre d'atomes

déplacés sans passer par l'énergie de dommage, leur idée était de modifier un peu l'équation de Lindhard et utilisée des méthodes proposés dans [14]. On considère l'ion incident à un instant "t" de son histoire dans la cible, La probabilité que cet ion déplace un atome de la cible après avoir parcourant une distance dR est donné par

$$N\int_{0}^{T_{m01}} P_1(T) \frac{d\sigma_{01}}{dT}(E,T) dT$$

 $\frac{d\sigma_{01}(E,T)}{dT}$ est la section efficace différentielle pour l'atome 0 d'énergie E de subir une collision avec un atome 1 en lui transmettant une énergie T.

 T_{m01} est l'énergie maximale transmissible lors d'une telle collision.

N est le nombre total d'atome par unité de volume.

 $P_1(T)$ est la probabilité pour l'atome 1 d'être définitivement déplacé de son puit lorsqu'il reçoit une énergie T. Cet atome primaire va engendrer une cascade de $n_{11}(T)$ de déplacement.

A prés ce parcours dR le projectile aura une énergie E-dE et l'équation s'écrit

$$n_{01}(E) = n_{01}(E - dE) + N dR \int_{0}^{I_{m01}} [P_1(T) + n_{11}(T)] \frac{d\sigma_{01}(E, T)}{dT} dT$$
 (3.1)

Soit $S_0(E)$ le pouvoir d'arrêt total de l'ion dans la cible

$$S_0(E) = \frac{1}{N} \frac{dE}{dR} \tag{3.2}$$

on a alors

$$S_0(E) = \frac{dn_{01}(E)}{dE} = \int P_1(T)d\sigma_{01}(E,T) + \int n_{01}(T)d\sigma_{01}(E,T)$$
 (3.3)

où la contribution des collisions primaires est celle des cascades sont séparés. Le nombre d'atomes déplacés par un atome de même nature que la cible animé d'une énergie E et qui est notée $n_{11}(E)$ vérifie l'équation

$$S_1(E) = \frac{dn_{11}(E)}{dE} = \int P_1(T)P_1(E-T)d\sigma_{11}(E,T) + \int n_{11}(T)d\sigma_{11}(E-T)$$
 (3.4)

Le terme $P_1(E-T)$ permet de tenir en compte d'un éventuel remplacement de l'atome éjecté par l'atome projectile. La généralisation de ces équations au cas d'un solide poly-atomique comprenant p type d'atomes se fait de la manière suivante :

Soit j l'indice affecté au type d'atome déplacés auquel on s'intéresse, on a :

$$S_0(E) = \frac{dn_{0j}(E)}{dE} = C_j \int P_j(T) d\sigma_{0j}(E, T) + \sum_{i=1}^p C_i \int n_{ij}(T) d\sigma_{0i}(E, T)$$
 (3.5)

les " n_{ij} " sont solutions du système de p équations suivantes :

$$S_{1}(E) = \frac{dn_{ij}(E)}{dE} = C_{j} \int \prod_{ij} (T) d\sigma_{ij}(E, T) + \sum_{k=1}^{p} C_{k} \int n_{kj}(T) d\sigma_{ik}(E - T),$$

$$j = 1, 2, \dots, p \qquad (3.6)$$

avec
$$\begin{cases} \prod_{ij}(T) = P_j(T) & \text{si } i \neq j \\ \prod_{ij}(T) = P_j(T)P_j(E - T) & \text{si } i = j \end{cases}$$

pour tenir compte des remplacements, c'est-à-dire le terme $\prod_{ij}(T)$ permet de prendre en considérations les remplacements possibles.

3.1 Formalisme mathématique :

Pour résoudre de problème dans un formalisme mathématique on considère l'équation générale

$$P_m(x) = \int_{x-1}^{x} k(x, y) P_m(y) dy + \sum_{m'=0}^{m} \int_{0}^{x-1} k(x, y) P_{m-m'}(y) P_m(x-y-1) dy$$
 (3.7)

On se propose d'utiliser cette équation pour calculer u(x) le nombre moyen de déplacements crées par un primaire d'énergie E dans un solide, en tenant compte à chaque déplacement de l'énergie E_d perdue par le secondaire pour se libérer de l'énergie de liaison qui le retient dans son puits de potentiel,

avec;

$$x=\frac{E}{E_d}$$

 $P_m(x)$ est la probabilité pour un primaire d'énergie x de déplacer m atome.

Ce problème physique peut être modéliser par une équation intégrale de type Volterra.

En pratique, il est plus convenable de chercher les solutions des équations intégrales de Volterra par des méthodes numérique. Dans ce chapitre on va utiliser le théorème de contraction de Banach pour trouver l'existence de la solution du problème posé et on propose une méthode numérique convenable pour le calcul de la solution approchée.

3.2 Etude Théorique

Dans une première étape, on cherche à montrer que le problème du calcul du nombre moyen de déplacement se ramène à la résolution d'une équation intégral de type Volterra, pour cela on pose ;

$$g(x,t) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{mt} P_m(x)$$
(3.8)

avec
$$g(x,0) = 1$$

 $x \ge 0$

et

$$u(x) = \frac{d}{dt}g(x,t)\Big|_{t=0} \qquad si \quad x \ge 0$$

$$u(x) = 0 \qquad si \quad x < 0$$

Par un calcul simple on peut montrer que

$$g(x,t) = \int_{x-1}^{x} k(x,y)g(y,t)dy + \int_{0}^{x-1} k(x,y)g(y,t)g(x-y-1,t)dy$$

En effet

$$\begin{split} g(x,t) &= \sum_{m=0}^{\infty} e^{mt} P_m(x) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \left[e^{mt} \left(\int_{x-1}^{x} k(x,y) P_m(y) dy + \sum_{m'=0}^{\infty} \int_{0}^{x-1} k(x,y) P_{m-m'}(y) P_m(x-y-1) dy \right) \right] \\ g(x,t) &= \sum_{m=0}^{\infty} e^{mt} \int_{x-1}^{x} k(x,y) P_m(y) dy \\ &+ \sum_{m=0}^{\infty} e^{mt} \left[\sum_{m'=0}^{\infty} \int_{0}^{x-1} k(x,y) P_{m-m'}(y) P_m(x-y-1) dy \right] \\ \sum_{m=0}^{\infty} e^{mt} \int_{x-1}^{x} k(x,y) P_m(y) dy &= \sum_{m=0}^{\infty} \int_{x-1}^{x} e^{mt} k(x,y) P_m(y) dy \\ &= \int_{x-1}^{x} \sum_{m=0}^{\infty} e^{mt} k(x,y) P_m(y) dy = \int_{x-1}^{x} k(x,y) \left(\sum_{m=0}^{\infty} e^{mt} P_m(y) \right) dy \\ \sum_{m=0}^{\infty} e^{mt} \int_{x-1}^{x} k(x,y) P_m(y) dy &= \int_{x-1}^{x} k(x,y) g(y,t) dy \end{split}$$

D'autre part, par le changement de variable m - m' = 1 on peut montrer que :

$$\sum_{m=0}^{\infty} e^{mt} \left[\sum_{m'=0}^{\infty} \int_{0}^{x-1} k(x,y) P_{m-m'}(y) P_{m'}(x-y-1) dy \right]$$

$$= \int_{0}^{x-1} k(x,y) g(y,t) g(x-y-1,t) dy$$

donc

$$g(x,t) = \int_{x-1}^{x} k(x,y)g(y,t)dy + \int_{0}^{x-1} k(x,y)g(y,t)g(x-y-1,t)dy$$

On a

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{dg}{dt}(x,t) \Big|_{t=0} \\ &\frac{dg}{dt}(x,t) = \frac{d}{dt} \left[\int_{x-1}^{x} k(x,y) g(y,t) dy \right] + \frac{d}{dt} \left[\int_{0}^{x-1} k(x,y) g(y,t) g(x-y-1,t) dy \right] \\ &\frac{dg}{dt}(x,t) = \int_{x-1}^{x} k(x,y) \frac{dg}{dt}(y,t) dy + \int_{0}^{x-1} k(x,y) \frac{dg}{dt}(y,t) g(x-y-1,t) dy \\ &+ \int_{0}^{x-1} k(x,y) \frac{dg}{dt}(x-y-1,t) g(y,t) dy \end{aligned}$$

$$u(x) = \frac{dg}{dt}(x,t) \Big|_{t=0}$$

$$= \int_{x-1}^{x} k(x,y) u(y) dy + \int_{0}^{x-1} k(x,y) u(y) g(y,t) dy + \int_{0}^{x-1} k(x,y) u(y) g(x-y-1,t) dy$$
et on a

$$\int_{0}^{x} k(x,y) (u(y) + u(x - y - 1)) dy = u(x)$$

équation intégral qui peut s'écrire

$$u(x) = \int_{0}^{x} k(x, y) u(x - y - 1) dy + \int_{0}^{x} k(x, y) u(y) dy$$

On pose

$$f(x) = \int_{0}^{x} k(x, y)u(x - y - 1)dy$$

on a alors

$$u(x) = f(x) + \int_{0}^{x} k(x, y)u(y) dy$$

C'est une équation intégrale du type Volterra elle est linéaire et du second espèce. Le théorème de contraction de Banach parant de trouver l'existence de solution pour cette équation intégral.

Proposition:

L'équation intégral

$$u(x) = f(x) + \int_{0}^{x} k(x, y) u(y) dy$$

où

$$u(x) = 0$$
 si $x < 0$

$$u(x) = 1$$
 $si \ 0 \le x \le 1$

k(x, y) est densité de probabilité définie pour $0 \le y \le x$, tel que

$$|k(x,y)| \leq M, M > 0$$

admet une solution unique.

Démonstration:

On pose

$$Au = \int_{0}^{x} k(x, y)u(y)dy$$

On considère l'opérateur $T: L^2(\Omega) \to L^2(\Omega), \quad u \to Tu$

$$Tu(x) = f(x) + Au(x)$$
, Ω un domaine borné.

Soit $n \in \mathbb{N}$, on démontre que T^n est une contraction.

$$Tu = f + Au$$

$$T^{2}u = T(Tu) = T(f + Au) = f + A(f + Au) = f + Af + A^{2}f$$

Par récurrence sur n on trouve

$$T^n u = f + Af + A^2 f + \dots + A^{n-1} f + A^n u$$

Soient $u, v \in L^2(\Omega)$

$$||T^n u - T^n v|| = ||A^n u - A^n v||$$

$$A^n u = \int_0^x k(x, y) u(y) \, dy$$

$$A^n v = \int_0^x k(x, y) v(y) \, dy$$

On cherche une approximation de $k_n(x, y)$

On a

$$Au = \int_{0}^{x} k(x, y) u(y) dy$$

$$A^{2}u = A(Au) = \int_{0}^{x} k(x,y)Au(y)dy$$

$$= \int_{0}^{x} k(x,y) \left(\int_{0}^{y} k(y,z)u(z)dz \right) dy = \int_{0}^{x} u(z)dz \left(\int_{z}^{x} k(x,y)k(y,z)dy \right)$$

On pose

$$k_{1}(x,y) = k(x,y)$$

$$k_{2}(x,y) = \int_{y}^{x} k_{1}(x,z)k(z,y)dz$$

$$\vdots$$

$$k_{n}(x,y) = \int_{z}^{x} k_{n-1}(x,z)k(z,y)dz$$

On peut montrer par récurrence que

$$|k_n(x,y)| \le \frac{M^n(x-y)^{n-1}}{(n-1)!}$$

En utilisant ce résultat et des majorations convenables on trouve

$$||T^n u - T^n v|| < \frac{M^n}{(n-1)!} ||u - v||$$

Pour *n* assez grand on a $\frac{M^n}{(n-1)!} < 1$

et donc T^n est un contraction et par suit l'opérateur T^n admet un point fixe unique noté u_0 qui vérifie $T^n(u_0) = u_0$.

 u_0 vérifie aussi $T(u_0)=u_0$. En effet

$$\begin{split} 0 &\leq \|Tu_0 - u_0\| = \|T(T^nu_0) - T^nu_0\| \\ &= \|T^n(Tu_0) - T^nu_0\| \\ 0 &\leq \|Tu_0 - u_0\| \leq k\|Tu_0 - u_0\| \quad \text{tel que} \quad k = \frac{M^n}{(n-1)!} < 1 \end{split}$$

 $\underline{\text{donc}} \quad 0 \le (1 - k) \| T u_0 - u_0 \| \le 0$

comme k < 1 alors on a obligatoirement

$$||Tu_0 - u_0|| = 0$$
 c. a. d; $Tu_0 = u_0$

Conclusion:

L'équation intégrale de Volterra

$$u(x) = f(x) + \int_{0}^{x} k(x, y)u(y)dy \qquad x \ge 1$$

admet une solution unique u_0 .

comme on peut le remarquer l'existence de la solution ne pouvait pas être démontrer si on a pas poser la condition k(x, y) est borné (majoré par M > 0).

De plus, on suppose toujours que k(x, y) est borné pour pouvoir utiliser les méthodes numérique pour calculer u(x)

1) D'un point de vu physique, le noyau k(x, y) de l'équation intégral représente la section efficace normalisée de collision atomique

$$\int_{0}^{x} k(x,y)dy = 1 \quad et \begin{cases} k(x,y) \ge 0 & pour \ 0 \le y \le x \\ k(x,y) = 0 \end{cases}$$

$$2) \ k(x,y) = \frac{\sigma(x,y)}{\int_{0}^{x} \sigma(x,y)dy}$$

$$\sigma(x,y) = \sigma_{elastique}(x,y) + \sigma_{inelastique}(x,y)$$

- 3) D'autre part, $k(x,x) = Sup_{0 \le y \le x} k(x,y)$ dans le problème de collision atomique puisque l'échange d'énergie nul est l'évènement le plus probable.
- 4) $k(x,0) = Inf_{0 \le y \le x} k(x,y)$ car l'échange total d'énergie est l'évènement le plus improbable au cours d'un choc atomique.
- 5) Si $k(x,y) \in C^m$ $(0 \le y \le x < \infty)$ alors, $u(x) \in C^m$ ($[m,+\infty[$) tel que $m=0,1,2,\ldots,n+1$.

Ce résultat important qui permet de voir que si $k(x,y) \in C^1(0 \le y \le x < \infty)$ alors, $u(x) \in C^2([2,+\infty[).$

ce qui anseur la continuité de la dérivée seconde si l'on veut utiliser la méthode des splines cubiques pour la résolution numérique de cette équation intégral.

3.3 Etude Numérique

Dans cette partie on va voir comment utiliser la méthode des splines cubique linéaire pour la résolution de notre équation intégrale . La question qui se pose est :

Pourquoi la méthode des splines cubique linéaire pour la résolution numérique ?

En fait, dans [8] l'auteur à montrer que sous certaines conditions $\lim_{x\to\infty} \frac{u(x)}{1+x}$ existe et elle est égale à une constante $c\in[0,1]$. C'est-à-dire que u(x) tend à devenir linéaire quand x augmente pour cette raison la méthode des splines cubiques est la mieux placée pour donnée une approximation de u(x) quand u(x) et k(x,y) sont de classe C^1 .

D'après [8] la solution approchée de l'équation intégrale ci-dessus peut être donnée par la méthode de splines cubique de la manière suivante

$$u(x) = f(x) + \int_{0}^{x} k(x, y)u(y)dy$$

où f(x) et k(x,y) sont continues

$$0 \le y \le b < \infty$$
, $0 \le y \le x$.

Les N + 1 splines cardinaux peuvent être introduites avec les conditions aux limites suivantes :

$$\mathcal{A}_{j}^{"}(x_{0}) = \mathcal{A}_{j}^{"}(x_{1}) \quad \text{et} \quad \mathcal{A}_{j}^{"}(x_{n-1}) = \mathcal{A}_{j}^{"}(x_{n})$$

$$\mathcal{A}_{i}(x_{i}) = \delta_{i,i} \quad (i, j = 0, 1, \dots, N)$$

$$(3.9)$$

($\delta_{i,i}$, symbole de KRONECKER).

Le spline d'interpolation de ce type est :

$$S(x) = \sum_{j=0}^{N} u_j \mathcal{A}_j(x)$$
(3.10)

avec

$$u_j=u(x_j)$$

Si

$$E(x) = u(x) - S(x), x > 1$$
 (3.11)

alors si $1 \le x \le 2$

$$S(x) = \int_{1}^{x} k(x, y)S(y)dy + f(x) + g(x)$$
 (3.12)

avec

$$f(x) = \int_{0}^{1} k(x, y) dy + \int_{1}^{x} k(x, x - y) dy$$
 (3.13)

$$S(x) = \int_{1}^{x} k(x, y) S(y) dy + \int_{2}^{x} k(x, x - y) S(y - 1) + f(x) + g(x)$$
 (3.14)

avec

$$f(x) = \int_{0}^{1} k(x, y) dy + \int_{1}^{2} k(x, x - y) dy$$
 (3.15)

et

$$g(x) = \int_1^x k(x, y)E(y)dy - E(x) \qquad 1 \le x \le 2$$

$$g(x) = \int_{1}^{x} k(x,y)E(y)dy + \int_{2}^{x} k(x,x-y)E(y-1)dy - E(x), \quad x > 2$$
 (3.16)

nous allons déterminer les u_i en remplaçant $g(x_i)$ par zéro, (i = 0,1,...,N).

Nous devons écrire pour $1 \le x_j \le 2$ précaution nécessaire à cause de la discontinuité de u(x) (en x = 0):

$$\sum_{i=0}^{N} u_{i} \mathcal{A}_{i}(x_{j}) = \int_{1}^{x_{j}} k(x_{j}, y) \sum_{i=0}^{N} u_{i} \mathcal{A}_{i}(y) dy + \int_{0}^{1} k(x_{j}, y) dy + \int_{1}^{x_{j}} k(x_{j}, x_{j} - y) dy$$
(3.17)

et pour $x_i > 2$

$$\sum_{i=0}^{N} x_{i} \mathcal{A}_{i}(x_{j}) = \int_{1}^{x_{j}} k(x_{j}, y) \sum_{i=0}^{N} u_{i} \mathcal{A}_{i}(y) dy + \int_{1}^{x_{j}-1} k(x_{j}, x_{j} - y - 1) \sum_{i=0}^{N} u_{i} \mathcal{A}_{i}(y) dy + \int_{1}^{1} k(x_{j}, y) dy + \int_{1}^{2} k(x_{j}, x_{j} - y) dy$$

$$(3.18)$$

L'avantage de cette méthode sur une intégration classique est ici évident. Il n'est plus nécessaire de calculer u(x) sur chaque intervalle $n < x \le n+1$, le résultat est obtenu, en un seul calcul, en résolvant le système linéaire :

$$u_{j} = f_{j} + \sum_{i=0}^{N} I_{j,i} u_{i} + \sum_{i=0}^{N} J_{j,i} u_{j} \qquad j = 0, 1, \dots, N$$
(3.19)

avec

$$I_{j,i} = \int_{1}^{x} k(x_j, y) \mathcal{A}_i(y) dy$$
 (3.20)

 $J_{j,i} = 0$ pour j tel que $x_j \le 2$

$$J_{j,i} = \int_{1}^{x_j - 1} k(x_j, x_j - y - 1) \mathcal{A}_i(y) dy \quad pour \ j \ tel \ que \ x_j > 2$$
 (3.21)

$$f_{j} = f(x_{j}) = \int_{0}^{1} k(x_{j}, y) dy + \int_{1}^{x_{j}} k(x_{j}, x_{j} - y) dy \quad x_{j} \le 2$$
 (3.22)

$$f_{j} = \int_{0}^{1} k(x_{j}, y) dy + \int_{1}^{2} k(x_{j}, x_{j} - y) dy \qquad x_{j} > 2$$
 (3.23)

Ce système linéaire est bien conditionné dans la mesure où k(x, y) est suffisamment régulier. Si le spline cubique d'interpolation est remplacé par sa valeur, nous obtenons :

$$S(x) = M_{j-1} \frac{(x_j - x)^3}{6h_j} + M_j \frac{(x - x_{j-1})^3}{6h_j} + \left(u_{j-1} - \frac{M_{j-1}h_j^2}{6}\right) \left(\frac{x_j - x}{h_j}\right) + \left(u_j - \frac{M_j h_j^2}{6}\right) \left(\frac{x - x_{j-1}}{h_j}\right)$$
(3.24)

où les M_i sont les moments et h_i le pas. En remplaçant dans le système précédant :

$$u_{j} = f_{j} + \sum_{i=1}^{j} M_{i-1} \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} k(x_{j}, y) \frac{(x_{i} - y)^{3}}{6h_{i}} dy + M_{i} \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} k(x_{j}, y) \frac{(y - x_{i} - 1)^{3}}{6h_{i}} dy$$

$$+ \left(u_{i-1} - \frac{M_{i-1}h_{i}^{2}}{6}\right) \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} k(x_{j}, y) \frac{(x_{i} - y)}{6h_{i}} dy + \left(u_{i} - \frac{M_{i}h_{i}^{2}}{6}\right). \tag{3.25}$$

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i}} k(x_{i}, y) \frac{(y - x_{i-1})}{h_{i}} dy + \sum_{i=1}^{j} M_{i-1} \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} k(x_{j}, x_{j} - y - 1) \frac{(x_{i} - y)^{3}}{6h_{i}} dy$$

$$+ M_{i} \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} k(x_{j}, x_{j} - y - 1) \frac{(y - x_{i-1})^{3}}{6h_{i}} dy$$

$$+ \left(u_{i-1} - \frac{M_{i-1}h_{i}^{2}}{6}\right) \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} k(x_{j}, x_{j} - y - 1) \frac{(y - x_{i-1})}{h_{i}} dy.$$

$$+ \left(u_{i} - \frac{M_{i}h_{i}^{2}}{6}\right) \int_{x_{i}}^{x_{i}} k(x_{j}, x_{j} - y - 1) \frac{(y - x_{i-1})}{h_{i}} dy.$$

 \sum' : signifie que la sommation s'effectue jusqu'à x_{j-1} si x > 2, la somme est nulle si $x_j \le 2$.

Dans la pratique, on emploie un pas constant $h_j = h$, j = 0,1,...,N. Dans [5] les M_j sont donner on suivante la technique suivants : dans un cadre mathématique on considère un intervalle $a \le x \le b$, et on les subdivises Δ : $a = x_0 < x_1 < < x_N = b$.

Pour chaque x_i on associe y_i tel que $Y: y_0, y_1, \ldots, y_N$, et on définie la fonction $S_{\Delta}(Y; x)$ est qui peut être noté par $S_{\Delta}(x)$ or $S_{\Delta,Y}(x)$ qui est continue par rapport à sa première et deuxième dérivé sur l'intervalle [a, b], et qui vérifie les conditions suivantes ; sur chaque sous intervalle on a $x_{j-1} \le x \le x_j$, $(j = 1, 2, \ldots, N)$, on a $S_{\Delta}(Y; x_j) = y_j$ $(j = 0, 1, \ldots, N)$, on désigne par M_j le "moment" $S_{\Delta}^{"}(x_j)$ $(= 0, 1, \ldots, N)$. A partir de linéarité de la dérivé seconde on peut écrire l'équation suivante sur l'intervalle $[x_{j-1}, x_j]$

$$S''_{\Delta}(x) = M_{j-1} \frac{x_j - x}{h_j} + M_j \frac{x - x_{j-1}}{h_j}$$
(3.26)

où $h_j = x_j - x_{j-1}$. On intégraux deux fois cette équation on trouve :

$$S_{\Delta}(x) = M_{j-1} \frac{\left(x_{j} - x\right)^{3}}{6h_{j}} + M_{j} \frac{\left(x - x_{j-1}\right)^{3}}{6h_{j}} + \left(y_{j-1} - \frac{M_{j-1}h_{j}^{2}}{6}\right) \frac{x_{j} - x}{h_{j}} + \left(y_{j} - \frac{M_{j}h_{j}^{2}}{6}\right) \frac{x - x_{j-1}}{h_{j}},$$

$$j = 0, 1, \dots, N$$

$$(3.27)$$

$$S'_{\Delta}(x) = -M_{j-1} \frac{\left(x_j - x\right)^2}{2h_j} + M_j \frac{\left(x - x_{j-1}\right)^2}{2h_j} + \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j} - \frac{M_j - M_{j-1}}{6}h_j$$
(3.28)

A partir de (3.28) nous avons, pour les limites unilatérales de la dérivée, [5] les expressions

$$S'_{\Delta}(x_{j} -) = \frac{h_{j}}{6} M_{j-1} + \frac{h_{j}}{3} M_{j} + \frac{y_{j} - y_{j-1}}{h_{j}}$$

$$S'_{\Delta}(x_{j} +) = -\frac{h_{j+1}}{3} M_{j} - \frac{h_{j+1}}{6} M_{j+1} + \frac{y_{j+1} - y_{j}}{h_{j+1}}$$

$$(3.29)$$

En vertu les fonctions (3.26) et (3.27) sont continues en [a, b]. La continuité de $S''_{\Delta}(x)$ à x_j donne au moyen de (3.29) la condition

$$\frac{h_j}{6}M_{j-1} + \frac{h_j + h_{j+1}}{3}M_j + \frac{h_{j+1}}{6}M_{j+1} = \frac{y_{j+1} - y_j}{h_{j+1}} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j}$$
(3.30)

Pour le rachis non périodique, deux conditions supplémentaires doivent être spécifiées, les « conditions finales », pour déterminer les N+1 grandeurs M_0, M_1, \ldots, M_N spécifier la pente de la spline en a et b donne l'analogue de la poutre doublement en porte-à-faux. Pour $S'_{\Delta}(a) = y'_0$ et $S'_{\Delta}(b) = y'_N$ on obtient des (3.29) les relations

$$2M_0 + M_1 = \frac{6}{h_1} \left(\frac{y_1 - y_0}{h_1} - y_0' \right), \qquad M_{n-1} + 2M_n = \frac{6}{h_n} \left(y_n' - \frac{y_n - y_{n-1}}{h_n} \right)$$

Les réglages $M_0 = 0$ et $M_N = 0$ correspondent à la mise en place de supports simples aux extrémités la condition

$$M_0 - \lambda M_1 = 0, \qquad 1 > \lambda > 0$$

équivaut à placer un simple support à $x_{-1} = (x_0 - \lambda x_1)/(1 - \lambda)$ et à exiger que toute la courbe sur $x_{-1} \le x \le x_1$ soit l'arc d'un cube un choix commun de λ est $\frac{1}{2}$.

Nous sommes généralement concernés par les conditions de fin, que, pour plus de commodité, nous écrivons sous la forme :

$$2M_0 + \lambda_0 M_1 = d_0, \qquad \mu_n M_{n-1} + 2M_n = d_n \tag{3.31}$$

Nous introduisons la notation

$$\lambda_j = \frac{h_{j+1}}{h_j + h_{j+1}}, \quad \mu_j = 1 - \lambda_j$$
 $(j = 1, 2, ..., N - 1)$

l'exigence de continuité (3.30) devient alors

$$\mu_j M_{j-1} + 2M_j + \lambda_j M_{j+1} = 6 \frac{[(y_{j+1} - y_j)/h_{j+1}] - [(y_j - y_{j-1})/h_j]}{h_j + h_{j+1}}$$
(3.32)

Pour le spline non périodique, les équations de définition (3.30) et (3.31) sont maintenant écrite comme

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_2 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 2 & \lambda_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \mu_n & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix}$$

Les conditions finales sont maintenant classées en termes de M_i comme suit

at
$$x = a$$
:

(i)
$$2M_0 + M_1 = \frac{6}{h_1} \left(\frac{y_1 - y_0}{h_1} - y_0' \right),$$

(ii)
$$2M_0 = 2y_0''$$
,

(iii)
$$2M_0 + \lambda_0 M_1 = d_0,$$
 at $x = b$:

(i)
$$M_{N-1} + 2M_N = \frac{6}{h_N} \left(y_N' - \frac{y_N - y_{N-1}}{h_1} \right)$$

$$(ii) 2M_N = 2y_N^{\prime\prime},$$

$$(iii) \qquad \mu_N M_{N-1} + 2M_N = d_N,$$

est suffit de résoudre le système suivant :

$$2M_0 + \lambda_0 M_1 = d_0,$$

$$\mu_1 M_0 + 2M_1 + \lambda_1 M_2 = d_1,$$

$$\mu_2 M_1 + 2M_2 = d_2,$$

$$\dots$$

$$2M_{n-2} + \lambda_{n-1} M_{n-1} = d_{n-2},$$

$$\mu_{n-1} M_2 + 2M_{n-1} + \lambda_{n-1} M_n = d_{n-1},$$

$$\mu_n M_{n-1} + 2M_n = d_n,$$

CONCLUSIONS

Dans ce mémoire, nous avons résolu un problème physique de collision atomique, dans le but de calculer le nombre de déplacement par atome. Le problème est modélisé par un équation intégrale de type Volterra, l'existence de la solution de cette équation ; qui représente le nombre de déplacement chercher ; a été prouver par le théorème de point fixe de Banach. Nous avons présenté aussi une méthode numérique qui fait intervenir des splines cubiques. Cette méthode est considéré comme la meilleure méthode qui donne la solution approche de notre équation.

Malheureusement, vue les conditions difficiles dans les quelles nous avons travaillé on a pas pu faire une programmation numérique.

On souhaite ; dans l'avenir ; qu'on puisse développer mieux l'étude numérique via des splines cubiques et tester les résultats.

Références bibliographiques

- [1] Alberman, A. Le sueurs. Détermination de fonctions de dommages pour les matériaux polyatomique irradies en réacteurs de recherche. COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE 1987.
- [2] A. RAHMOUNE. sur la résolution numérique des équations integrale en utilisant des fonctions spécial, THESE de DOCTORA en sciences, UNIV de Batna, 2011.
- [3] D. LESUEUR, Phil. Mag. <u>44</u> (1981) 905.
- [4] F. Bachiri. Théorèmes du point fixe et Applications aux Equations intégrales, mémoire de MASTER, UNIV de M'SILA, 2017.
- [5] J. H. AHLBERG, E. N. NILSON, J. L. WALSH. The Theory of Splines and Their Applications. ACADEMIC PRESS, New York and London 1967.
- [6] J. LANDHARD, M. SCHARFF, H. E. SCHIOTT, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. <u>33</u> (14) (1963) .
- [7] J. LINDHARD, V. NIELSEN, M. SCHARFF, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33 (10) (1963).
- [8] J. MARIE, L'équation de Volterra de la théorie statistique de la creation de paires de Frenkel dans un solide soumis à une irradiation neutronique, THESE de DOCTEURA, François CHAMAYOU, (1973).
- [9] J. P GENTHON, B. W°ys . 48 (1977) 1822.
- [10] K. Atkinson, w. Han, theoretical Numerical Analysis: A functional Analysis. Framework. Springer- verlag, New York, 2001.
- [11] KRESS, R. Linear Integral Equations, Springer- Verlag, New York, 2d ed 1999.
- [12] M .MANSOUR. approches par les splines des équations intégrales de Volterra, mémoire se MASTER, UNIV de M'SILA, 2019.
- [13] M. SAID . MT31-Méthodes numériques. Institut universitaire professionnalisé d'Evry 1999.
- [14] M. S. MILLER, J. W. BORING, Phys. Rev. A <u>9</u> (1974) 2421.
- [15] M. T. ROBINSON, Radiation Induced Voids in Metals USAEC-CONF-710601 (1972).
- [16] P. Linz, Analytical and Numerical. Methods for Volterra Equations. SIAM Studies in Applied

- Mathematics. Philadephia (1985).
- [17] Sarah Hameed Harbi AL-khalidi. Volterra Integral Equations Using Non-Polynomial Spline Functions. University of Baghdad,2009.
- [18] W. L. ZIJP, H. J. NOLTHENIUS. G. C. VERHAAG, Damage cross- section library DAMSIG 84 Rapport ECN- 159 (Petten) (1984).
- [19] Y. DROULERS et C. MEUNIER, physique des rayonnements issus d'un réacteur à eau légère. Rapport C. E. A. 3180 (1967).
- [20] Y. MATSUTANI, S. ISMINO, J. of Applid Phys. 48 (1977) 1822.