

Keltoum KALICHE (Versailles)

**Résolution d'EDP elliptiques en domaines non bornés
par une méthode sans troncature**

Our aim here is to propose a method for solving second order elliptic problems with varying coefficients in unbounded multi-dimensional domains, such as exterior domains, half-spaces or the whole space. This method is based on the use of inverted finite elements and weighted Sobolev spaces for describing the behavior of functions at large distances. The method preserves the unboundness of the domain since no truncation is introduced. After analyzing the convergence of the error, we display some 3D simulations which confirm the efficiency of the method and its reliability. Then, we target the resolution of equations arising in the PCM model which describes the effects of a solvent on a molecular system.

Le but ici est de proposer une méthode efficace pour résoudre des équations elliptiques de second ordre ayant des coefficients variables et cela dans des domaines multi-dimensionnels non bornés, comme par exemple les domaines extérieurs, les demi-espaces ou l'espace tout entier. La méthode repose sur l'utilisation éléments finis inversés et des espaces de Sobolev pondérés pour décrire le comportement des fonctions dans les régions lointaines. Après avoir effectué une analyse numérique rigoureuse montrant la convergence de l'erreur, on montrera quelques résultats numériques qui prouvent l'efficacité de la méthode. On ciblera ensuite la résolution des équations issues du modèle PCM décrivant l'effet d'un solvant sur un système moléculaire.