



Méthodes numériques et conditions aux limites artificielles pour les équations de Schrödinger linéaires et non linéaires et modélisation d'irrégularités du plasma ionosphérique terrestre

Christophe Besse

► To cite this version:

Christophe Besse. Méthodes numériques et conditions aux limites artificielles pour les équations de Schrödinger linéaires et non linéaires et modélisation d'irrégularités du plasma ionosphérique terrestre. Mathématiques [math]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2004. tel-00008640

HAL Id: tel-00008640

<https://theses.hal.science/tel-00008640>

Submitted on 2 Mar 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Document de synthèse

Présenté en vue d'obtenir

L'HABILITATION A DIRIGER LES RECHERCHES

Université Paul Sabatier, Toulouse 3

Spécialité:

Mathématiques Appliquées

par

Christophe BESSE

TITRE DE L'HABILITATION :

***Méthodes numériques et conditions aux limites artificielles
pour les équations de Schrödinger linéaires et non linéaires
et modélisation d'irrégularités du plasma ionosphérique
terrestre***

Soutenue le 8 décembre 2004 devant le jury composé de

François Alouges	<i>Rapporteur,</i>	Université d'Orsay.
Kazuo Aoki	<i>Examineur,</i>	Université de Kyoto (Japon).
Naoufel Ben Abdallah	<i>Examineur,</i>	Université de Toulouse 3.
Matania Ben Artzi	<i>Rapporteur,</i>	Université de Jérusalem (Israël).
Charles Bruneau-Henri	<i>Examineur,</i>	Université de Bordeaux 1.
Thierry Colin	<i>Examineur,</i>	Université de Bordeaux 1.
Pierre Degond	<i>Examineur,</i>	CNRS et Université de Toulouse 3.
Gérard Gallice	<i>Examineur,</i>	CEA Cesta.
Jean-Michel Roquejoffre	<i>Examineur,</i>	Université de Toulouse 3.
Catherine Sulem	<i>Rapporteur,</i>	Université de Toronto (Canada).

REMERCIEMENTS

Il y a huit ans, je rencontrais pour la première fois Pierre Degond dans un pré-fabrique de l'Université Paul Sabatier. Je venais lui demander s'il m'était possible de disposer de manière épisodique au sein du laboratoire MIP d'un coin de bureau et d'un accès au mail pendant la fin de ma thèse. Je me souviendrai toujours de cette première rencontre. Je venais de rencontrer une personne profondément humaine qui a fait plus qu'exhausser mes vœux. Deux ans plus tard, il m'accueillait de manière définitive dans le bâtiment 1R2 de l'UPS. Nos rencontres se firent alors plus fréquentes et nous commençâmes à travailler ensemble sur différents projets, scientifiques ou non. Il m'accorda toujours sa confiance et devant mes hésitations pour l'encadrement de mon premier doctorant, il sut me rassurer et m'encourager. Sa motivation aura toujours été un moteur pour moi. Outre l'aspect humain, Pierre est un grand scientifique et un grand pédagogue. Durant nos nombreuses réunions de travail, j'ai pu profiter de son expérience et il n'est pas un moment où je n'aie appris quelque chose. J'aurais en outre eu, grâce à lui, l'opportunité de rencontrer des chercheurs d'horizons variés. C'est donc avec un grand respect, une profonde amitié et une immense gratitude que je remercie Pierre pour tous ses encouragements.

Je souhaite exprimer ma très vive reconnaissance envers François Alouges qui a accepté de rapporter sur ce mémoire. Je suis très honoré qu'il ait pu donner son avis de spécialiste sur mes travaux de recherche. Nos chemins se sont déjà souvent croisés et j'espère sincèrement qu'ils le feront de manière encore plus fréquentes dans l'avenir.

Matania Ben Artzi m'a aussi fait le grand honneur de bien vouloir évaluer mes travaux. Chacune de nos rencontres m'aura permis d'apprendre et nos contacts auront toujours été très agréables et instructifs grâce à sa gentillesse et ses grandes connaissances scientifiques.

C'est avec un profond respect que je souhaite remercier Catherine Sulem d'avoir bien voulu donner son avis sur ce document. Ses travaux auront été au coeur de mes recherches et il est inutile de préciser que son jugement a une immense valeur à mes yeux.

Ma reconnaissance va évidemment à Naoufel Ben Abdallah qui a bien voulu participer à ce jury. J'ai eu la chance et l'honneur de partager son bureau pendant quelques années, ce qui m'aura permis de bénéficier de ses nombreuses idées (au moins dix par seconde). Nos discussions auront souvent tourné à la franche rigo-

lade, et son enthousiasme aura été un véritable moteur pour moi. Je crois que sa marque est présente dans nombre de mes travaux, et que certains lui doivent beaucoup. Je le remercie, évidemment et avant tout, pour son amitié et son éternel soutien.

Pouvoir profiter de la présence de Jean-Michel Roquejoffre dans ce jury est un véritable plaisir. Il aura été mon collègue, mon Directeur de laboratoire, mais surtout mon ami. Discuter de mathématiques avec lui est toujours un réel plaisir. Je souhaite ainsi lui exprimer ma très vive reconnaissance pour tous ses conseils et ses encouragements.

C'est une immense joie de retrouver à l'occasion de ce jury Charles-Henri Bruneau et Thierry Colin qui m'ont tous les deux donné le goût de la recherche en Mathématiques Appliquées. J'ai eu la chance de bénéficier de leurs apports complémentaires et je leur dois énormément.

Je suis très honoré de la présence de Gérard Gallice dans mon jury. Je veux le remercier pour nos rencontres toujours empruntées d'une amitié sincère. En grand numéricien, Gérard a toujours su trouver le moyen d'améliorer ou de corriger les quelques schémas numériques que j'ai pu étudier. Je le remercie aussi pour ses encouragements.

Kazuo Aoki me fait l'honneur de participer à ce jury. Je l'en remercie vivement.
どうもありがとう 教授 青木一生

Ce document est un recueil de travaux qui n'aurait finalement pas vu le jour sans mes nombreux collaborateurs : Xavier Antoine, Brigitte Bidégaray, Antoine Bourgeade, Charles-Henri Bruneau, Jean Claudel, Pierre Degond, Fabrice Deluzet, Stéphane Descombes, Gérard Gallice, David Lannes, Norbert Mauser, Vincent Mouysset, Raphaël Poncet, Olivier Saut, Hans-Peter Stimming, Christian Tessieras et Hyung Ju Hwang. Ils ont évidemment tous contribué de manière importante à mes recherches et je considère comme une grande chance d'avoir pu travailler avec chacun d'eux.

Même si aucun article n'est encore finalisé, je souhaite faire un gros clin d'oeil à Komla Domelevo et Cédric Galusinski avec lesquels j'ai entrepris plusieurs travaux.

La fantastique ambiance au laboratoire MIP aura énormément contribué à mes différentes recherches. J'ai toujours pu trouver un espace de travail accueillant aux conditions de travail en tout point exceptionnelles. Venir travailler au laboratoire est ainsi un réel plaisir. Je souhaite pour cela exprimer toute ma gratitude à tous

les membres du laboratoire MIP. Je remercie tout particulièrement Fabrice, Florian, Luc, Komla, Marie-Hélène, Mohammed, Xavier, et la petite dernière Marjolaine. J'adresse aussi un *special thanks* à mes amis de la commission informatique David et Pascal, à Christine Marty, notre dévouée et amicale secrétaire, qui m'aura toujours aidé et à Alain Rigal pour son aide précieuse.

Comment me faire pardonner tous ces longs week-end ou soirées où j'aurais été simplement présent physiquement, mais où mon esprit vagabondait dans les mathématiques. Comment me faire pardonner ces absences pour cause de congrès. Comment me faire pardonner si ce n'est en remerciant pour leur patience et en associant mes chers enfants Aymeric et Anaëlle. Je les embrasse de tout mon coeur. Il me reste à remercier celle sans qui je n'aurais pas pu accomplir tout ce travail. Isabelle, avec qui j'ai commencé mes études scientifiques, avec qui j'ai partagé mes doutes, mes joies et mes soucis, a toujours été à mes côtés, m'a toujours soutenu et motivé. Merci à toi pour tout ce que tu fais.

Table des matières

Document de synthèse	9
1.1 Introduction	9
1.2 Méthodes numériques pour les équations de Schrödinger non linéaires et modélisation	11
1.2.1 Schéma de relaxation pour l'équation de Schrödinger non linéaire [2]	12
1.2.2 Convergence des méthodes de splitting pour l'équation de Schrödinger non linéaire [4]	14
1.2.3 Méthode de splitting pour les systèmes de Davey-Stewartson [5]	16
1.2.4 Méthodes numériques pour l'analyse de la résonance ondes courtes-ondes longues pour les ondes aquatiques de surfaces [6]	18
1.2.5 Etude du comportement en temps grands des solutions du système de Schrödinger-Debye par simulations numériques [7]	20
1.2.6 Modélisation de phénomènes liés à l'interaction laser matière [8]	22
1.3 Conditions aux limites absorbantes pour les équations de Schrödinger linéaires et non linéaires	23
1.3.1 Approximation des conditions aux limites transparentes pour l'équation de Schrödinger linéaire monodimensionnelle [9]	27
1.3.2 Construction de conditions aux limites absorbantes pour l'équation de Schrödinger linéaire bidimensionnelle [11], [12]	30
1.3.3 Résolution numérique de l'équation de Schrödinger linéaire bidimensionnelle avec conditions aux limites absorbantes [13]	34
1.3.4 Conditions aux limites absorbantes pour l'équation de Schrödinger non linéaire cubique monodimensionnelle [14]	36
1.4 Modélisation de plasmas ionosphériques	39
1.4.1 Modélisation d'irrégularités du plasma ionosphérique terrestre [15]	41
1.4.2 Modélisation par turbulence d'instabilités du plasma ionosphérique [16]	43

Table des matières

1.4.3	Analyse des instabilités non linéaires du modèle striation [17]	46
1.4.4	Simulation numérique des striations ionosphériques en champ magnétique non uniforme [18]	47
1.5	Travaux de l'auteur classés par thèmes	51
1.5.1	Méthodes numériques pour les équations de Schrödinger non linéaires et modélisation	51
1.5.2	Conditions aux limites absorbantes pour les équations de Schrödinger linéaire et non linéaire	51
1.5.3	Modélisation d'instabilités du plasma ionosphérique terrestre, étude mathématique et numérique	52

Document de synthèse

1.1 Introduction

Les travaux de recherches présentés dans ce document sont axés autour de deux thèmes. La première thématique concerne l'élaboration de méthodes numériques pour la simulation des solutions d'équations de type Schrödinger linéaire et non linéaire intervenant en mécanique des fluides et en optique non linéaire, en couplant l'analyse de schémas numériques et la construction de conditions aux limites artificielles. Le deuxième thème aborde la modélisation de phénomènes d'instabilité dans le plasma ionosphérique terrestre. Ces travaux sont regroupés en trois parties indépendantes.

La première partie (Section 1.2), qui regroupe les références [2] à [8], traite de l'analyse numérique des schémas de relaxation et de splitting Fourier, ainsi que de leur application dans le cadre des systèmes de Davey-Stewartson et de l'interaction laser matière. Les schémas utilisés pour la simulation des solutions d'équations de type Schrödinger non linéaires doivent bien sûr être convergents mais aussi être construits dans un souci d'efficacité. En outre, ils doivent permettre de retrouver au niveau discret la préservation des invariants liés aux équations dispersives. Ces contraintes ont conduit à l'élaboration des deux schémas de relaxation et de splitting. Les études de convergence de ces schémas, appliqués soit directement à l'équation de Schrödinger non linéaire soit à d'autres systèmes dispersifs, constituent le thème central de cette partie. Dans le cadre de la mécanique des fluides, et en particulier de l'étude des ondes aquatiques de surface, nous appliquons respectivement le schéma de splitting et de relaxation au système de Davey-Stewartson et à sa généralisation tridimensionnelle pour l'étude de la résonance ondes longues-ondes courtes. Les simulations réalisées permettent soit de valider des comportements théoriques, soit, en leur absence, d'établir de nouvelles propriétés des modèles. Cette dernière thématique est reprise pour l'étude du système de Schrödinger-Debye intervenant dans la modélisation de l'interaction onde-matière pour des matériaux centro-symétriques. Bien que l'existence locale de solutions soit établie, le manque d'invariants ne permet pas de globaliser les solutions et ainsi d'imaginer leur comportement en temps grands. En couplant les deux schémas, nous en réalisons l'étude numérique. Enfin, nous reprenons la modélisation du phénomène d'interaction laser-matière pour des

matériaux cristallins.

Dans la seconde partie (Section 1.3) qui reprend les références [9] à [14], nous nous intéressons au développement de conditions aux limites artificielles pour l'équation de Schrödinger linéaire et non linéaire. Nous présentons la problématique en une dimension d'espace et rappelons dans ce cadre la forme explicite de la condition transparente. Elle met en jeu l'opérateur Dirichlet-Neumann qui est un opérateur fractionnaire non local en temps. Dans [9], nous en construisons des discrétisations stables. Nous proposons ensuite une construction d'approximations microlocales de la condition transparente pour le cas de la dimension deux d'espace pour un domaine géométrique de forme convexe arbitraire et dans le cas du disque. La difficulté majeure réside dans la non homogénéité, dans l'équation de Schrödinger, entre les variables de temps et d'espace, qui nécessite l'utilisation d'un calcul pseudo-différentiel adapté. Une fois les conditions absorbantes construites, nous adaptons les approximations de l'opérateur Dirichlet-Neumann issues de la dimension un, et développons des schémas stables d'approximation de type Crank-Nicolson pour l'équation de Schrödinger en dimension deux. Finalement, réutilisant les techniques mises en oeuvre pour la construction de ces conditions absorbantes, ainsi qu'un changement de jauge, nous élaborons une classe de conditions aux limites artificielles pour l'équation de Schrödinger non linéaire cubique en une dimension d'espace. Les tests numériques réalisés montrent leur efficacité.

La troisième partie (Section 1.4 et références [15] à [18]) est consacrée à la modélisation de phénomènes d'instabilités ayant lieu dans l'ionosphère terrestre. Ce plasma, issu en grande partie de l'interaction de la haute atmosphère avec les particules ionisantes solaires, est le siège de nombreuses instabilités qui perturbent les communications terre-satellites. Nous étudions le phénomène de striation de bulles de plasma plus denses que le milieu ambiant. Dans un premier article, partant du modèle complet d'Euler-Maxwell, nous établissons une hiérarchie de modèles dont la limite finale constitue le modèle striation. Ce modèle prend deux formes suivant le cadre d'utilisation. Le cas mono-couche utilise une géométrie simplifiée et permet de faciliter la simulation numérique et rend possible l'étude mathématique. Ce modèle est malheureusement linéairement instable. Une étude mathématique montre aussi son caractère non linéairement instable. Lors des limites successives conduisant au modèle striation mono-couche, les phénomènes de dissipation ont disparu. Ils sont cependant trop faibles pour permettre le gain de grandes plages de stabilité. Nous proposons d'utiliser la modélisation de la turbulence par une approche statistique comme pour les modèles $(K - \varepsilon)$ en mécanique des fluides. Le nouveau modèle comprend un terme diffusif additionnel dont les expériences numériques montrent l'effet stabilisateur. L'écoulement global est ainsi capturé pour différents maillages. Le modèle mono-couche ne permet cependant pas de réaliser des simulations réalistes. Nous reprenons donc le modèle striation dans une géométrie liée aux lignes de champ

magnétique dont les paramètres sont des quantités intégrées le long de ces lignes de champ. Il constitue le modèle striation multi-couches. Un schéma numérique est construit et différentes simulations permettent de retrouver l'évolution des striations des bulles de plasma ionosphérique.

1.2 Méthodes numériques pour les équations de Schrödinger non linéaires et modélisation

L'équation de Schrödinger non linéaire est un exemple typique d'équations dispersives. Le terme générique d'équations dispersives regroupe l'ensemble des équations dont la relation de dispersion, couplant fréquence temporelle et fréquence spatiale, induit des vitesses de groupe et des vitesses de phases variables en fonction du nombre d'onde. Dans le cas d'une non linéarité cubique, l'équation de Schrödinger non linéaire est donnée par

$$\begin{aligned} i\partial_t u + \Delta u + q|u|^2 u &= 0, \quad (x, t) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{+*}, \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}^d. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Elle apparaît dans plusieurs domaines de la physique pour la description d'ondes non linéaires telle que la propagation d'un faisceau laser dans un milieu Kerr, mais aussi pour les ondes aquatiques à la surface d'un fluide idéal de profondeur infinie, en physique des plasmas ou encore en mécanique quantique. Toutes ces situations sont décrites en détail dans Sulem-Sulem [SS]. Dans la plupart de ces exemples, l'équation apparaît comme la limite asymptotique pour l'enveloppe d'une onde dispersive lentement variable se propageant dans un milieu non linéaire. Un nouveau regain d'intérêt pour cette équation a été motivé par les récents travaux sur la condensation de Bose-Einstein pour des gaz de bosons ultra-froids, la non linéarité étant alors plus complexe. Cette équation modèle très riche mathématiquement, n'est évidemment pas la seule équation dispersive. On trouve par exemple, dans le contexte des ondes aquatiques de surface, l'équation de Korteweg-de-Vries (KdV) pour la modélisation d'une onde se propageant dans une direction fixe en faible profondeur. Pour décrire la stabilité des ondes de l'équation (KdV) par rapport aux perturbations transverses, on aboutit aux équations de Kadomtsev-Petviashvili (KP). Dans le cadre d'une profondeur intermédiaire, cette généralisation conduit aux **systèmes de Davey-Stewartson** (voir sous-section 1.2.3).

Le point commun de ces équations est qu'elles possèdent des solutions dont la densité d'énergie est essentiellement localisée dans une petite partie de l'espace, et qui évoluent sans aucun changement de forme perceptible. Ces **ondes solitaires** sont rendues possible par un équilibre entre l'effet dispersif dû au terme linéaire et l'effet

de compression dû à la non linéarité. Ces équations ont comme autre point commun de posséder une structure hamiltonienne et plusieurs **quantités conservées**. Par exemple, les quantités conservées pour l'équation de Schrödinger (1.1) sont l'énergie

$$\int_{\mathbb{R}^d} |u|^2(x, t) dx ,$$

et le Hamiltonien

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u|^2(x, t) - q \int_{\mathbb{R}^d} |u|^4(x, t) dx .$$

La simulation numérique des équations de type Schrödinger non linéaires constitue un enjeu important. Elle peut permettre de valider les théories, mais aussi guider les résultats lorsque celle-ci échoue. Les méthodes numériques doivent être précises mais surtout conduire à des schémas convergents. Dans le cadre des équations dispersives, elles doivent en outre permettre de conserver les invariants au niveau discret, ceci constituant une contrainte forte. Il faut aussi s'assurer de leur efficacité.

La recherche de schémas numériques pour les équations de type Schrödinger non linéaire est guidée par les contraintes d'efficacité, de précision, de convergence et de conservation de invariants. Cette thématique a été développée depuis mes travaux de thèse pour l'étude des systèmes de Davey-Stewartson et les travaux présentés dans cette partie en sont le prolongement. L'analyse numérique de deux types de schémas, relaxation et splitting, est réalisée. Dans [2] et [4], en collaboration avec B. Bidégaray (LMC Grenoble) et S. Descombes (ENS Lyon), nous analysons leur propriété de convergence. Les méthodes sont appliquées à plusieurs systèmes d'équations, comme dans [5], avec N. Mauser et H.-P. Stimming (Vienne), pour l'étude des systèmes de Davey-Stewartson, ou dans [6], avec D. Lannes (Bordeaux), pour la résonance ondes longues-ondes courtes. Dans [7], en collaboration avec B. Bidégaray, ces deux méthodes sont aussi mises en oeuvre pour l'étude du comportement en temps long des solutions du système de Schrödinger-Debye. Ce système apparaît lors de l'étude de l'interaction entre une onde électromagnétique et un matériau. La modélisation de ce phénomène est réalisée pour un cristal dans [8] par le système de Maxwell-Bloch.

1.2.1 Schéma de relaxation pour l'équation de Schrödinger non linéaire [2]

Les méthodes numériques pour les équations de Schrödinger non linéaires sont nombreuses, allant des méthodes classiques de type Crank-Nicolson [DFP], ou de type Runge-Kutta [ADK], aux méthodes symplectiques ou encore de type splitting (voir sous-section 1.2.2). **La méthode de relaxation** présentée ici n'appartient pas

aux catégories précédentes, mais permet de construire un schéma numérique semi discret en temps convergent, explicite et préservant les invariants des équations de Schrödinger. Elle peut aussi être appliquée aux autres systèmes dispersifs étudiés dans cette partie. Les travaux présentés dans cette sous-section ont débuté pendant ma thèse de doctorat et avaient été annoncés sous la forme d'une note aux Comptes Rendus de l'Académie des Sciences [3]. Ils ont été finalisés sous la forme de l'article [2] depuis mon arrivée au laboratoire MIP.

La non linéarité contenue dans (1.1) contraint les schémas numériques de type différences finies à la résolution d'une étape non linéaire par une méthode de Newton par exemple. Pour contourner cette difficulté, on peut utiliser une méthode de type Fourier-Splitting très efficace du point de vue coût de calcul, mais nécessitant alors une hypothèse de périodicité interdisant l'utilisation de conditions aux limites quelconques. L'explicitation de l'étape non linéaire est donc cruciale pour la diminution des coûts de calcul. Le schéma de relaxation est ainsi construit en transformant (1.1) sous la forme artificielle d'un système de deux équations

$$\begin{cases} \phi = |u|^2, & (x, t) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{+*}, \\ i\partial_t u + \Delta u = \lambda \phi u, & (x, t) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{+*}, \end{cases} \quad (1.2)$$

avec $u(x, 0) = u_0(x)$. D'un point de vue continu, ce système est bien entendu équivalent à (1.1). La méthode consiste donc à considérer (1.1) comme un système de Schrödinger-Poisson où l'équation de Poisson pour le potentiel ϕ est remplacée par la forme explicite $\phi = |u|^2$. Soit N le nombre de points de discrétisation temporelle définissant ainsi le pas de temps $\delta t = T_{\delta t}/N$. Les équations de (1.2) sont alors respectivement discrétisées aux temps $t_n = n\delta t$ et $t_{n+1/2} = (n + 1/2)\delta t$, $n = 1, \dots, N$. On définit les variables $\phi^{n+1/2}$ et u^{n+1} qui représentent respectivement les approximation de $|u|^2$ au temps $t_{n+1/2}$ et de u au temps t_{n+1} . On obtient ainsi le schéma semi discret de relaxation

$$\begin{cases} \frac{\phi^{n+1/2} + \phi^{n-1/2}}{2} = |u^n|^2, & x \in \mathbb{R}^d, \\ i\frac{u^{n+1} - u^n}{\delta t} + \Delta\left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2}\right) = \lambda\left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2}\right)\phi^{n+1/2}, & x \in \mathbb{R}^d, \end{cases} \quad (1.3)$$

avec les données initiales $u^0(x) = u_0(x)$ et $\phi^{-1/2}(x) = |u^0(x)|^2$. La discrétisation spatiale peut être réalisée soit par différences finies, soit par éléments finis.

Le problème de Cauchy résultant du schéma semi discret de relaxation est analysé. Après la démonstration de l'existence et de l'unicité de solutions régulières, la convergence de ces solutions vers les solutions de l'équation de Schrödinger non linéaire est établie. Bien que l'équivalence entre (1.1) et (1.2) soit évidente d'un point de vue

continu, cette propriété ne le reste pas au niveau semi discret. En effet, l'expression de ϕ doit alors être vue comme l'approximation de $\phi(x, t) = \int_0^t \partial_s |u|^2(x, s) ds$. Cette contrainte rend donc nécessaire le contrôle de l'équivalent discret de la dérivée temporelle de u . La preuve du caractère bien posé de (1.3) a donc lieu sur l'équivalent semi discret du système

$$\begin{cases} \partial_t \phi = 2\operatorname{Re}(\bar{u}v), & x \in \mathbb{R}^d, \\ i\partial_t u + \Delta u = \lambda \phi u, & x \in \mathbb{R}^d, \\ i\partial_t v + \Delta v = \lambda(2\operatorname{Re}(\bar{u}v)u + \phi v), & x \in \mathbb{R}^d. \end{cases}$$

La démonstration du résultat utilise une méthode de point fixe sur des formules de Duhamel pour l'équivalent semi discret du système précédent. La convergence du schéma de relaxation est réalisée en comparant les formules de Duhamel discrètes et continues. Nous montrons enfin que le schéma de relaxation conserve bien les quantités invariantes que sont l'énergie et le Hamiltonien.

Finalement, des expériences numériques permettent de déterminer l'ordre du schéma. La démonstration rigoureuse de l'ordre 2 reste encore non établie. La difficulté majeure est, comme pour les preuves précédentes, la non équivalence au niveau discret de l'égalité $\phi = |u|^2$.

1.2.2 Convergence des méthodes de splitting pour l'équation de Schrödinger non linéaire [4]

Les schémas de splitting sont très largement utilisés pour la simulation des solutions des équations de Schrödinger non linéaires [BJM1, BJM2, WW]. Il est courant d'utiliser les approximations d'ordre un (dites de Lie) ou d'ordre deux (dites de Strang). Cependant, la preuve de convergence à ces ordres précis n'est obtenue que formellement par la théorie formelle des algèbres de Lie [LV]. Une démonstration précise existe dans le cadre de l'ordre un mais ne peut être étendue telle quelle à l'ordre deux [Do]. Cette méthode a été utilisée pour la démonstration de la convergence de la méthode de splitting pour le système de Schrödinger-Debye, mais reste compliquée [7]. Dans une collaboration avec B. Bidégaray et S. Descombes, nous avons proposé une méthode systématique simple pour la preuve de convergence des schémas de splitting dans le cadre semi discret.

Nous considérons l'équation de Schrödinger non linéaire suivante

$$\begin{cases} \partial_t u + i\Delta u - F(u) = 0, & x \in \mathbb{R}^2, t > 0, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}^2, \end{cases}$$

où F est une fonction Lipschitz de constante K telle que $F(0) = 0$ et dont les quatre premières dérivées sont bornées. La solution est exprimée à partir du flot

$S(t)$ par $u(x, t) = S(t)u_0(x)$. On définit de même les flots associés respectivement aux parties linéaires et non linéaires par X^t , flot de $\partial_t v + i\Delta v = 0$, et Y^t , flot de $\partial_t w - F(w) = 0$. Nous avons ainsi $v(t) = X^t v_0$ et $w(t) = Y^t w_0$. Les méthodes de splitting consistent en l'approximation du flot S^t par combinaison de X^t et Y^t , que l'on note Z^t . Les approximations de Lie et de Strang sont donc respectivement définies par $Z_L^t = X^t Y^t$ (ou $Y^t X^t$) et par $Z_S^t = X^{t/2} Y^t X^{t/2}$ (ou $X^{t/2} Y^t X^{t/2}$). Nous démontrons alors le théorème de convergence suivant

Théorème 1.2.1. $\forall u_0 \in H^2(\mathbb{R}^2)$ et $T > 0$, $\exists C$ et h_0 tel que $\forall h \in (0, h_0]$ et n tel que $nh \leq T$

$$\|(Z_L^h)^n u_0 - S^{nh} u_0\|_{L^2} \leq Ch \|u_0\|_{H^2}.$$

De plus, si $u_0 \in H^4(\mathbb{R}^2)$, alors

$$\|(Z_S^h)^n u_0 - S^{nh} u_0\|_{L^2} \leq Ch^2 \|u_0\|_{H^4}.$$

La difficulté principale réside dans le fait que $(Z^h)^n \neq Z^{nh}$. Pour la surmonter, nous utilisons l'inégalité triangulaire qui permet d'obtenir l'estimation

$$\|(Z^h)^n u_0 - S^{nh} u_0\|_{L^2} \leq \sum_{j=0}^{n-1} \|(Z^h)^{n-j-1} Z^h S^{jh} u_0 - (Z^h)^{n-j-1} S^{(j+1)h} u_0\|_{L^2}.$$

Nous démontrons alors qu'il existe une constante C_0 telle que pour deux données initiales w_0 et w'_0 éléments de L^2 et tout $t \in [0, 1]$

$$\|Z^t w_0 - Z^t w'_0\|_{L^2} \leq (1 + C_0 t) \|w_0 - w'_0\|_{L^2}. \quad (1.4)$$

Ces deux inégalités conduisent à

$$\|(Z^h)^n u_0 - S^{nh} u_0\|_{L^2} \leq \sum_{j=0}^{n-1} (1 + C_0 h)^{n-j-1} \|(Z^h - S^h) S^{jh} u_0\|_{L^2}. \quad (1.5)$$

Nous sommes ainsi ramené à la simple étude du cas où à chaque pas de temps, la donnée initiale est la même pour le modèle continu et le splitting, soit $v_0 = S^{jh} u_0$ (bornée uniformément dans H^4 pour $jh \leq T$). Nous comparons donc $\tilde{u} = S^h v_0$ et $\tilde{v} = Z^h v_0$. La formule de Duhamel pour $S(h)$ conduit à

$$\tilde{u}(h) = X^h v_0 + \int_0^h X^{h-s} F(\tilde{u}(s)) ds.$$

Alors,

$$\tilde{u}(h) - \tilde{v}(h) = \int_0^h X^{h-s} [F(\tilde{u}(s)) - F(\tilde{v}(s))] ds + R(h),$$

le terme $R(h)$ constituant le reste. Or, F est Lipschitz et X^h est unitaire dans L^2 . L'équation précédente donne donc l'estimation suivante

$$\|(Z_{L,S}^h - S^h)v_0\|_{L^2} \leq \int_0^h \|(Z_{L,S}^s - S^s)v_0\|_{L^2} ds + \|R(h)\|_{L^2}, \quad v_0 = S^{jh}u_0$$

Il reste à montrer que le reste vérifie $\|R(t)\|_{L^2} = O(t^{p+1})$ pour t petit et utiliser un lemme de Gronwall pour conclure que le schéma est d'ordre p .

1.2.3 Méthode de splitting pour les systèmes de Davey-Stewartson [5]

Le système de Davey-Stewartson apparaît dans le contexte des ondes aquatiques de surface. Le but est de décrire l'évolution de la surface libre dans des situations où à la fois la gravité et la capillarité du fluide contribuent au mouvement. On considère un fluide incompressible et non visqueux évoluant sur un fond plat d'étendue infinie sous l'action d'un champ de gravité constante. Sa hauteur au repos est notée h . L'écoulement est supposé irrotationnel définissant ainsi le vecteur vitesse comme gradient du potentiel $\phi(x, y, z, t)$. L'élévation de la surface libre perturbée est notée $\zeta(x, y, t)$. Alors, ϕ et ζ vérifient le système

$$\begin{aligned} \partial_x^2 \phi + \partial_y^2 \phi + \partial_z^2 \phi &= 0, & -h < z < \zeta, \\ \partial_t \zeta - \partial_z \phi &= 0, & z = \zeta \\ \partial_t \phi + g\zeta - T(\partial_x^2 \zeta + \partial_y^2 \zeta) &= 0, & z = \zeta. \\ \partial_z \phi &= 0, & z = -h, \end{aligned} \tag{1.6}$$

où T désigne la tension de surface. On suppose que la surface libre subit une déformation du type onde progressive

$$\begin{aligned} \zeta(X, Y, \tau) &= \varepsilon \left(\frac{i}{\omega} A(x, y, t) \sinh(kh) e^{i(kx - \omega t)} + c.c \right) \Big|_{x=\varepsilon(X - c_g \tau), y=\varepsilon Y, t=\varepsilon^2 \tau} \\ &+ O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

L'onde se déplace ainsi suivant la direction privilégiée x et est lentement modulée dans la direction transverse y . Le vecteur d'onde et la fréquence temporelle sont liés par la relation de dispersion $\omega^2 = k(g + Tk^2) \tanh(kh)$, permettant ainsi de déterminer la vitesse de groupe $c_g = \omega'(k)$.

On recherche alors les solutions ϕ et ζ du système sous la forme d'un développement en puissance de ε

$$f = \sum_{m=1}^{\infty} \varepsilon^m \sum_{p=-\infty}^{\infty} f_{m,p} \exp(ip(kx - \omega t)).$$

On montre que l'amplitude complexe A de ζ et le premier terme $\phi_{1,0}$ du développement de ϕ sont déterminés par le système Davey-Stewartson

$$\begin{cases} i\partial_t A + \frac{1}{2}\omega''(k)\partial_x^2 A + \frac{c_g}{2k}\partial_y^2 A = \frac{k}{c_g \sinh(2kh)}\left(\frac{c_g\omega}{g} + \sinh(2kh)\right)\phi_{1,0}A - \nu|A|^2 A \\ (gh - c_g^2)\partial_x^2 \phi_{1,0} + gh\partial_y^2 \phi_{1,0} = -c_g^2\left(1 + \frac{g \sinh(2kh)}{c_g\omega}\right)\partial_x^2 |A|^2 \end{cases} \quad (1.7)$$

La première équation de ce système est une équation de Schrödinger non linéaire avec une terme de forçage, et la seconde est une équation linéaire qui est soit elliptique, soit hyperbolique, suivant que la vitesse de groupe c_g des ondes de gravité capillarité est moins ou plus grande que la vitesse $\sqrt{gh}$ des ondes longues de gravité. Le signe de $\omega''(k)$ pouvant varier, Ghidaglia et Saut [GS] ont introduit la classification des systèmes de Davey-Stewartson comme elliptique-elliptique (E-E), elliptique-hyperbolique (E-H), hyperbolique-elliptique (H-E) et hyperbolique-hyperbolique (H-H), ce dernier cas n'étant pas valable dans le cadre des ondes aquatiques de surface. Pour certaines valeurs des paramètres dans les cas (E-H) et (H-E), ces systèmes sont intégrables par inverse scattering et admettent des solutions de types solitons.

Les études numériques de solutions des systèmes (1.7) sont peu nombreuses. Dans [1], C.-H. Bruneau et moi-même avons appliquée la méthode de relaxation aux différents cas décrits précédemment. Dans [WW], White et Weideman ont pour la première fois appliqué la méthode de splitting-Fourier aux équations de Davey-Stewartson, mais ont limité leur étude aux cas (E-H) et (H-E) intégrables. Dans [5], en collaboration avec N. Mauser et H.-P. Stimming, et en suivant les techniques élaborés dans [4] (voir aussi sous-section 1.2.1), nous avons appliqué cette même méthode et avons montré la convergence des solutions du schéma vers les solutions de (1.7) dans les cas (H-E) et (E-E). Ces cadres permettent en fait de réécrire le système (1.7) sous la forme d'une équation de Schrödinger non linéaire et non locale en inversant l'opérateur hyperbolique de la seconde équation. Il suffit en effet, si l'on écrit (1.7) sous la forme

$$\begin{aligned} i\partial_t u + \lambda\partial_x^2 u + \partial_y^2 u &= \nu|u|^2 u + u\partial_x \psi, \\ \alpha\partial_x^2 \psi + \partial_y^2 \psi &= \chi\partial_x(|u|^2), \end{aligned} \quad (1.8)$$

de remarquer que pour $\alpha = \chi = 1$, $\psi_x = E(|u|^2)$, où l'opérateur intégral E est défini en variables de Fourier par

$$\widehat{E(f)}(\xi_1, \xi_2) = \frac{\xi_1^2}{\xi_1^2 + \xi_2^2} \hat{f}(\xi_1, \xi_2).$$

Ainsi, le système (1.8) se réduit à l'équation de Schrödinger

$$i\partial_t u + L_\lambda u = \nu|u|^2 u + \nu_1 E(|u|^2)u = F(u)$$

avec $L_\lambda = \lambda \partial_x^2 + \partial_y^2$ et $\lambda = \pm 1$. Plusieurs expériences numériques permettent de retrouver les résultats de [1] et d'étudier les propriétés de blow-up des solutions, validées par une comparaison avec les taux théoriques d'explosion. En outre, ces expériences ont permis de montrer, comme c'est le cas pour l'équation de Schrödinger non linéaire, un possible phénomène de multi-focalisation.

1.2.4 Méthodes numériques pour l'analyse de la résonance ondes courtes-ondes longues pour les ondes aquatiques de surfaces [6]

Plusieurs instabilités ou résonances ont été étudiées pour le système de Davey-Stewartson (1.7). Lorsque la vitesse de groupe c_g du mode fondamental est exactement égal à la vitesse de phase $\sqrt{gh}$ des ondes longues, on obtient la résonance ondes longues-ondes courtes. Dans ce cadre, la résonance apparaît de manière évidente car le système de Davey-Stewartson se réduit en une équation de Schrödinger non linéaire dans lequel le terme cubique est proportionnel à $1/(c_g^2 - gh)$ qui devient alors infini. Djordjevic et Redekopp ont alors proposé dans cette limite un nouveau scaling qui permet de prendre en compte cette résonance

$$\begin{cases} i\partial_t A + \frac{1}{2}\omega''(k)\partial_x^2 A = \phi_{1,0}A \\ \partial_t \phi_{1,0} = -\alpha \partial_x |A|^2 \end{cases}$$

où α peut être déterminé de manière explicite.

Lorsque la propagation ne suit plus simplement une direction privilégiée, cette résonance est encore présente. C et P.-L. Sulem [SS] ont ainsi étendu le résultat précédent et obtiennent

$$\begin{cases} i\partial_t A + \frac{1}{2}\omega''(k)\partial_x^2 A = \frac{k}{c_g \sinh(2kh)}(c_g \omega + g \sinh(2kh))\phi_{1,0}A, \\ \partial_t \phi_{1,0} + \frac{c_g}{2}\partial_x^{-1}\partial_y^2 \phi_{1,0} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\sinh(2kh)}{\omega} + \frac{c_g}{g}\right)\partial_x |A|^2, \end{cases} \quad (1.9)$$

La seule modification est la dispersion transverse sur le flot moyen $\phi_{1,0}$. Le terme $\partial_x^{-1}\partial_y^2 \phi_{1,0}$ est le même que celui apparaissant dans les équations de Kadomtsev-Petviashvili (KP). D'un point de vue numérique, le système de (KP) a été peu étudié et aucune étude n'a été réalisée pour le système (1.9). Le terme $\partial_x^{-1}\partial_y^2 \phi_{1,0}$ rend en fait la construction de schémas numériques difficile. La seule étude pouvant être reliée à (1.9) a lieu dans le cadre des impulsions courtes en optique non linéaire. Dans [AR], D. Alterman et J. Rauch prouvent que l'approximation classique de

Schrödinger n'est plus valide et montrent, dans le cas linéaire, qu'elle doit être remplacée par l'équation

$$2\partial_{xt}u = \partial_y^2 u. \quad (1.10)$$

C'est exactement la partie linéaire de l'équation sur le flot moyen dans le système (1.9). On remarque en effectuant le changement de variables $z_0 := (t+x)/\sqrt{2}$, $z_1 := (t-x)/\sqrt{2}$, $z_2 := y$ que l'équation (1.10) devient

$$\square_z u = 0, \quad \square_z := \partial_{z_0}^2 - (\partial_{z_1}^2 + \partial_{z_2}^2).$$

L'équation (1.10) se réduit ainsi à une équation des ondes dans un jeu de coordonnées pivotées de 45° .

Nous étudions donc le système

$$i\partial_t u + \partial_x^2 u = u\partial_x v \quad (1.11)$$

$$\partial_t v + \partial_x^{-1} \partial_y^2 v = -|u|^2, \quad (1.12)$$

qui est relié à (1.9) par les relations $u = A$ et $\partial_x v = \phi_{1,0}$. Dans [CL], Colin et Lannes ont prouvé l'existence de solutions régulières sans toutefois réussir à en assurer l'unicité. Comme pour les systèmes de Davey-Stewartson, plusieurs invariants existent, et notamment l'énergie et le Hamiltonien. Pour l'étude numérique, nous transformons l'équation (1.12) en dérivant chaque terme par rapport à x . L'équation à résoudre est donc $\partial_t \partial_x v + \partial_y^2 v = -\partial_x |u|^2$. La méthode numérique mise en oeuvre utilise le schéma de relaxation semi discret (voir sous-section 1.2.1). Nous discrétisons ainsi (1.11) au temps $t_{n+1/2}$ et (1.12) au temps t_n . Le schéma s'écrit ainsi

$$\begin{cases} i \frac{u^{n+1} - u^n}{\delta t} + \partial_x^2 \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) = \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) \partial_x v^{n+1/2}, \\ \partial_x \left(\frac{v^{n+1/2} - v^{n-1/2}}{\delta t} \right) + \partial_y^2 \left(\frac{v^{n+1/2} + v^{n-1/2}}{2} \right) = -\partial_x |u^n|^2. \end{cases}$$

Si les termes $v^{n-1/2}$ et u^n sont connus, la seconde équation peut être vue comme une équation de la chaleur non homogène unidimensionnelle pour $v^{n+1/2}$ où x jouerait le rôle du temps et y celui de la variable d'espace. Ce problème peut paraître mal posé. En effet, $\partial_x v + \partial_y^2 v = -\partial_x f$ est une équation de la chaleur rétrograde. Cependant, une étude de Fourier permet de montrer que $\hat{v} = \frac{i\tau}{i\tau + \xi^2} \hat{f} := E(\tau, \xi) f$. Ainsi, $|E(\tau, \xi)| \leq 1$ et E est donc un multiplicateur de Fourier. Si le second membre est remplacé par f , alors $E := 1/(i\tau + \xi^2)$ et le problème est mal posé. Nous utilisons des différences finies pour la discrétisation spatiale associées à des conditions aux limites de Dirichlet pour u et v à la frontière du domaine de calcul. Nous montrons alors qu'il existe une unique solution du problème totalement discrétisé qui vérifie les invariants au niveau discret. Nous prouvons enfin que le schéma est stable sous

l'hypothèse de petites données initiales. Les conditions explicites sont fournies.

Les expérimentations numériques montrent l'effet de la dispersion sur u prépondérantes dans la direction x . Le comportement du flot moyen v est surprenant. La rotation d'axes de 45° est visible par les traces laissées par la solution (voir FIG. 1.1) Nous réalisons enfin des simulations pour des données excédant les conditions de stabilité. Elles permettent de voir les effets purement non linéaires.

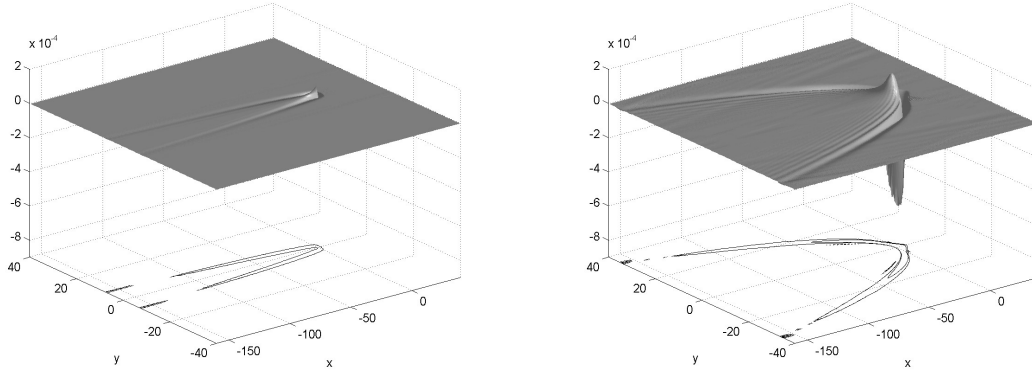


Figure 1.1: Le flot moyen v à différents instants

1.2.5 Etude du comportement en temps grands des solutions du système de Schrödinger-Debye par simulations numériques [7]

Lors de l'interaction entre une onde électromagnétique et un matériau, les molécules constituant le milieu ont tendance à réagir à l'action du champ et à s'aligner avec celui-ci. Deux types d'interactions ont lieu : l'une magnétique, l'autre électrique. Nous nous intéressons ici simplement à l'interaction avec le champ électrique : c'est le phénomène de polarisation. L'onde électromagnétique évolue suivant les équations de Maxwell macroscopiques qui, sous l'hypothèse de l'absence de charges et de courants de charges, s'écrivent

$$\begin{cases} \partial_t B = -\nabla \times E, \\ \partial_t D = \nabla \times H, \\ \nabla \cdot B = 0, \\ \nabla \cdot D = 0. \end{cases}$$

Afin de fermer ces équations, on rajoute donc des lois constitutives du matériau. Dans les milieux étudiés, nous supposons que la partie magnétique ne donne pas lieu

à un phénomène particulier et nous avons simplement $B = \mu_0 H$. Par contre, comme le milieu répond au champ électrique, la relation linéaire entre D et E est modifiée et nous écrivons de manière classique $D = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty E + P$ où ε_∞ est la permittivité relative à fréquence infinie. Nous retrouvons alors aisément l'équation des ondes pour E

$$-\Delta E + \nabla(\nabla \cdot E) + \frac{\varepsilon_\infty}{c^2} \partial_t^2 E = -\frac{1}{c^2 \varepsilon_0} \partial_t^2 P.$$

Pour des matériaux non linéaires, la polarisation s'exprime en fonction de la susceptibilité χ par la relation $P = \chi(E) \varepsilon_0 E$. La susceptibilité est elle même liée à l'indice n du matériau par $n = \sqrt{1 + \chi}$. Si l'on considère un matériau Kerr centrosymétrique qui répond instantanément à l'action de l'onde, alors l'indice n vérifie $n(E) = n_0(E) + n_2 |E|^2$. En réalité, les matériaux répondent au champ avec un certain retard et n vérifie dans ce cas $n(E) = n_0(E) + \nu(|E|)$ où ν est solution de l'équation de Debye

$$\tau \partial_t \nu + \nu = n_2 |E|^2.$$

Ainsi, la polarisation est donnée par $P = \varepsilon_0 (n_0^2 + 1) E + 2 \varepsilon_0 n_0 \nu(E) E$. L'approximation paraxiale et d'enveloppes lentement variables conduit dans le cas des matériaux sans retard à l'équation classique de Schrödinger non linéaire (1.1). Dans le cas de matériaux à retard, l'approximation paraxiale donne, après adimensionnement, le système

$$\begin{cases} \partial_z A + \partial_t A - \frac{i}{2} \Delta_{xy} A = -i \nu A, \\ \tau \nu_t + \nu = \varepsilon |A|^2. \end{cases} \quad (1.13)$$

où A désigne l'enveloppe complexe de E et $\varepsilon = \pm 1$. L'asymptotique formelle $\tau \rightarrow 0$ conduit immédiatement à l'équation de Schrödinger non linéaire.

Des études de B. Bidégaray [Bi1, Bi2] ont montré l'existence locale et l'unicité de solutions régulières pour le problème de Cauchy du système (1.13) et ont aussi permis de justifier le passage formel $\tau \rightarrow 0$. Contrairement aux autres équations dispersives, ce système manque d'invariants. La seule quantité conservée est l'énergie, qui ne suffit pas à assurer l'existence globale des solutions ou bien à démontrer des phénomènes d'explosion en temps fini. Face à l'échec des méthodes d'analyse pour l'étude du comportement en temps long du système (1.13), nous avons utilisé les simulations numériques en choisissant des méthodes adaptées et convergentes.

L'étude numérique du comportement en temps long n'a pas lieu sur le système (1.13), mais sur un système simplifié sans justification physique. Pour cela, nous supprimons la dépendance en z de l'amplitude. Nous obtenons ainsi **le système de Schrödinger-Debye** qui est une perturbation simple de l'équation de Schrödinger non linéaire. Pour permettre des études sur le comportement explosif des solutions,

nous avons aussi généralisé la non linéarité pour obtenir

$$\begin{cases} i\partial_t A + \frac{1}{2}\Delta A = \nu A, \\ \tau\nu_t + \nu = \varepsilon|A|^p. \end{cases} \quad (1.14)$$

Il faut s'assurer que les méthodes numériques reflètent les propriétés de l'équation et non celle du schéma choisi. Nous avons donc choisi de développer de front plusieurs schémas de philosophies différentes : des schémas de type Crank-Nicolson, un schéma de relaxation et un schéma de type splitting-Fourier. Nous démontrons l'existence de solutions pour chacun des schémas semi discrets étudiés et leurs convergences respectives vers les solutions du problème continu. Les expériences numériques, tant en une dimension d'espace avec une non linéarité d'ordre 5, qu'en deux dimensions d'espace avec une non linéarité cubique, semblent montrer un comportement explosif des solutions, comme pour l'équation de Schrödinger focalisante correspondante, pour de faibles valeurs de τ . Le comportement pour des valeurs plus importantes du paramètre τ ne permet pas de conclure à un retard dans l'explosion en temps fini, mais plutôt à un phénomène de stabilisation. Ces études semblent donc montrer, comme pour l'équation de Schrödinger non linéaire classique, qu'il existe des solutions qui explosent avec retard en temps fini. La preuve théorique de ce résultat reste à ce jour une question ouverte.

1.2.6 Modélisation de phénomènes liés à l'interaction laser matière [8]

Le développement des lasers depuis les années 60 a permis d'observer des réponses non linéaires d'un milieu à l'onde lumineuse qui la traverse. Ces effets non linéaires peuvent être bénéfiques, comme c'est le cas lors du doublement de fréquence qui permet de produire des sources laser de haute fréquence, ou destructeurs comme l'effet Kerr qui peut conduire à la filamentation du faisceau laser endommageant ainsi les matériaux traversés. Parallèlement à la croissance de l'intensité des sources laser, la génération d'impulsions courtes est de plus en plus performante dépassant désormais le domaine des femto-secondes (10^{15} s).

L'étude numérique des lasers de puissance nécessite des modèles adaptés aux fortes intensités lumineuses. Les impulsions ultracourtes demandent des modèles appropriés du fait de leurs spectres larges.

Pour l'étude de ces interactions, de nombreux modèles macroscopiques, plus ou moins performants, qui décrivent la réponse du milieu sur de grandes échelles d'espace, existent déjà. Néanmoins, basés pour la plupart sur des modèles limites de développements asymptotiques des équations de Maxwell (développement en puissance du

champ électrique par exemple), ils perdent le caractère borné des quantités mises en jeu. Pour de très fortes intensités, les effets de saturation ne sont plus visibles par exemple.

Notre approche consiste à considérer **le système de Maxwell-Bloch**, modèle semi classique de l'interaction onde matière. Il décrit la propagation de l'onde lumineuse, dont l'évolution est régie par les équations de Maxwell macroscopiques, à travers la matière qui réagit par le biais de la polarisation. Contrairement au traitement effectué dans la sous-section précédente, la polarisation est décrite au niveau quantique par les équations de Bloch. Cette approche a déjà été réalisée pour l'interaction avec des gaz [BAR]. La difficulté est ici de considérer un matériau cristallin. Dans ce type de matériau, une forte anisotropie existe. L'onde est déviée et des axes liés au réseau cristallin microscopique sont à prendre en compte. D'autre part, l'approche quantique de la polarisation met en jeu un nombre infini d'états d'énergie discrets. Des approximations permettent évidemment de réduire le nombre d'inconnues. Utilisant des résultats expérimentaux sur les susceptibilités optiques du cristal et un modèle de susceptibilité linéaire, nous avons décrit les conditions nécessaires d'accord qu'il implique sur la structure microscopique.

Une hiérarchie de modèles à nombres finis de niveaux d'énergie a alors été déterminée en collaboration avec B. Bidégaray (LMC Grenoble), A. Bourgeade (CEA Cesta), P. Degond (MIP) et O. Saut (MIP) dans l'article [8] qui décrit le modèle de Maxwell-Bloch à plusieurs niveaux. Dans sa thèse, O. Saut a construit un schéma numérique en une dimension et deux dimensions d'espace. Il a comparé le modèle de Maxwell-Bloch à des modèles macroscopiques classiques et à montrer son efficacité dans certaines situations.

1.3 Conditions aux limites absorbantes pour les équations de Schrödinger linéaires et non linéaires

La plupart des problèmes physiques décrits mathématiquement par une équation (ou un système d'équations) aux dérivées partielles sont définis dans un domaine non borné de $\mathbb{R}^d$. Si l'on désire résoudre numériquement des problèmes d'évolution dans tous l'espace, on est donc amené à rendre fini le domaine de calcul. Plusieurs méthodes peuvent être envisagées, comme par exemple l'utilisation d'équations intégrales pour l'acoustique ou l'électromagnétisme, ou encore des méthodes d'éléments finis. La méthode sans doute la plus utilisée consiste à définir un domaine de calcul artificiel $\Omega_i \subset \mathbb{R}^d$ et ainsi à ramener le problème global sur un domaine tronqué. Cette troncature induit nécessairement la recherche de conditions aux limites adaptées sur

la frontière fictive Γ du domaine de calcul. Cette démarche générale conduit donc à la détermination de **conditions aux limites artificielles**. Ces conditions aux limites ne sont pas contenues dans la formulation du problème originel : elles doivent être obtenues par une transformation. Cette transformation doit fournir une approximation de la solution sur le domaine non borné par la solution calculée dans le domaine fini avec la frontière artificielle. Cette méthodologie a déjà été appliquée avec succès dans plusieurs domaines des mathématiques appliquées comme par exemple pour l'électromagnétisme, la mécanique des fluides, etc ... [HR, EM2, GK]. Clairement, ces conditions artificielles doivent permettre de considérer des domaines de calcul de taille minimale, et ainsi de construire potentiellement des algorithmes rapides de calcul des solutions. Cependant, ce but ne peut pas être atteint sans quelques difficultés. Premièrement, il faut savoir définir ces conditions aux limites, qui sont le plus souvent non locales en espace et en temps. Deuxièmement, le traitement numérique (approximation, stabilité, efficacité) des conditions analytiques est une question délicate. Nous présentons donc dans cette partie un ensemble de travaux décrivant la détermination et la discrétisation de conditions aux limites artificielles pour l'équation de Schrödinger linéaire et non linéaire en dimension $d = 1$ et $d = 2$ d'espace.

Les équations de Schrödinger linéaires et non linéaires ont d'importantes applications en mécanique des fluides, en optique non linéaire, pour la propagation des faisceaux lasers dans des milieux inhomogènes, en physique des plasmas, dans l'industrie des semi-conducteurs, etc ...(voir Section 1.2). Nous considérons ainsi l'équation de Schrödinger en dimension d avec potentiel ($d = 1$ ou 2)

$$\begin{aligned} i\partial_t u + \Delta u &= V(x, t)u, & (x, t) &\in \mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_t^{*+}, \\ u(x, 0) &= u_0(x), & x &\in \mathbb{R}_x^d, \end{aligned} \quad (1.15)$$

où Δ désigne l'opérateur Laplacien en dimension d , et V est un potentiel pouvant dépendre à la fois de la variable d'espace x et de la variable de temps t . Si $V(x, t) = -q|u|^2(x, t)$, on retrouve l'équation de Schrödinger (1.1) de type non linéaire cubique, focalisante si $q > 0$ et défocalisante si $q < 0$. Il est à noter dès à présent que si **le potentiel V est indépendant de x , un changement de jauge** permet de passer de (1.15) à l'équation de Schrödinger linéaire

$$\begin{aligned} i\partial_t u + \Delta u &= 0, & (x, t) &\in \mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_t^{*+}, \\ u(x, 0) &= u_0(x), & x &\in \mathbb{R}_x^d, \end{aligned} \quad (1.16)$$

et ce quelle que soit la dimension d'espace. Il suffit en effet de définir

$$v(x, t) = u(x, t) \exp \left(i \int_0^t V(s) ds \right), \quad (1.17)$$

où v est solution de (1.16) pour que u soit solution de (1.15). Ainsi, la recherche d'une condition aux limites pour l'équation de Schrödinger linéaire avec potentiel dépendant du temps revient à la recherche de cette condition pour (1.16). Cette situation est souvent celle utilisée dans les applications. Nous considérons en effet en général un potentiel V qui peut dépendre de x simplement à l'intérieur du domaine de calcul Ω_i et ne dépend que du temps en dehors.

Si la donnée initiale u_0 est à support compact dans Ω_i , on cherche donc à établir une condition aux limites sur la frontière fictive Γ avec comme objectif principal que la solution calculée avec cette condition approche au mieux la solution exacte sur l'espace entier restreinte à Ω_i . Si la solution approchée coïncide avec la solution exacte, la condition aux limites sera dite **exacte** ou **transparente** et on la notera CLT (seul le cas de la dimension un permet d'identifier condition exacte et condition transparente, une distinction sera faite dans le cadre des dimensions supérieures). Dans le cas où une partie de l'«énergie» est absorbée par la frontière, on dira que la condition aux limites est **absorbante** et sera notée CLA. Ces deux types de conditions permettent souvent de s'assurer que le nouveau problème aux limites est bien posé. Soit $\Lambda(x, t, \partial_t)$ l'opérateur Dirichlet-Neumann (DN) agissant sur Γ associé à l'équation de Schrödinger. Alors, les données de Dirichlet et de Neumann sur Γ vérifient

$$\partial_{\mathbf{n}} u(x, t) + i\Lambda u(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}_t^{*+}, \quad (1.18)$$

où $\mathbf{n}$ désigne la normale unitaire sortante au domaine Ω_i . Si l'on parvient à déterminer de manière exacte Λ , on dispose alors d'une condition aux limites transparente.

Dans le cadre de l'équation de Schrödinger linéaire (1.16) unidimensionnelle ($d = 1$), il est possible de construire de manière explicite l'opérateur Dirichlet-Neumann exact [BP] à l'aide d'une analyse par transformée de Laplace. Soit $\Gamma = \{x_l\} \cup \{x_r\}$ la frontière fictive du domaine $\Omega_i =]x_l, x_r[$ et $\Omega_l = \{x \in \mathbb{R}, x < x_l\}$ et $\Omega_r = \{x \in \mathbb{R}, x > x_r\}$ respectivement les domaines complémentaires à gauche et à droite de Ω_i . De manière formelle, si l'on considère des solutions régulières de (1.16), alors elles doivent être C^1 aux points frontières x_l et x_r . Ainsi, pour une donnée initiale à support compact dans Ω_i , u doit être solution sur chacun des sous domaines Ω_l , Ω_i et Ω_r des problèmes suivants

Ω_l	Ω_i	Ω_r
$i\partial_t w + \partial_x^2 w = 0$ $w(x, 0) = 0$ $w(-\infty, t) = 0$ $w(x_l, t) = \Phi_l(t), \Phi_l(0) = 0$ $\partial_n w(x_l, t) + i\Lambda_l \Phi_l(x_l, t) = 0$	$i\partial_t u + \partial_x^2 u = 0$ $u(x, 0) = u_0(x)$ $\partial_n u(x_l, t) + i\Lambda_l u(x_l, t) = 0$ $\partial_n u(x_r, t) + i\Lambda_r u(x_r, t) = 0$	$i\partial_t v + \partial_x^2 v = 0$ $v(x, 0) = 0$ $v(\infty, t) = 0$ $v(x_r, t) = \Phi_r(t), \Phi_r(0) = 0$ $\partial_n v(x_r, t) + i\Lambda_r \Phi_r(x_r, t) = 0$

La solution sur chacun des sous domaines peut être calculée par transformation de Laplace. Par exemple, si on note $\mathcal{L}v$ la transformée de Laplace par rapport à t de v , on peut exprimer v sur Ω_r . Soit τ la covariable associée à t définie par $\tau = a + ib$ où $a > 0$ et $b \in \mathbb{R}$. Par conséquent, il existe $\alpha > 0$ et $\beta < 0$ tels que $\sqrt{-i\tau} = \alpha + i\beta$. Après transformation par Laplace, $\mathcal{L}v$ vérifie $i\tau\hat{v} + \partial_x^2 \hat{v} = 0$ et on a ainsi $\mathcal{L}v(x, \tau) = A^+(\tau)e^{\alpha x + i\beta x} + A^-(\tau)e^{-\alpha x - i\beta x}$. Grâce à la condition aux limites à l'infini, il s'ensuit naturellement que A^+ est identiquement nul. Ainsi, nous en déduisons que $\mathcal{L}v(x, \tau) = e^{-\sqrt{-i\tau}(x-x_r)} \mathcal{L}\Phi_r(\tau)$, et par dérivation que $\partial_x \mathcal{L}v(x, \tau)|_{x=x_r} = \mathcal{L}(-i\Lambda_r \Phi_r)(\tau) = -\sqrt{-i\tau} \mathcal{L}v(x, \tau)|_{x=x_r} = -\sqrt{-i\tau} \mathcal{L}\Phi_r(\tau)$. Ainsi, par identification, nous avons :

$$\Lambda_r \Phi_r(t) = \mathcal{L}^{-1} \left(-i\sqrt{-i\tau} \mathcal{L}\Phi_r \right), \quad (1.19)$$

ou encore :

$$\Lambda_r(x, t, \partial_t) = \Lambda_r(\partial_t) = -ie^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2},$$

où l'opérateur fractionnaire $\partial_t^{1/2}$ est défini par :

$$\partial_t^{1/2} f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{f(s)}{\sqrt{t-s}} ds. \quad (1.20)$$

Un développement similaire pour w permet de conclure que la solution u de l'équation de Schrödinger linéaire vérifie en tout point de la frontière **la condition exacte** :

$$\partial_n u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u = 0, \quad (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}^{*+}. \quad (1.21)$$

Cette condition met en jeu un opérateur intégral de convolution la rendant ainsi non locale en temps. Seul le cas de la dimension un permet d'obtenir de manière explicite l'opérateur transparent. Les dimensions supérieures conduisent à des opérateurs qui sont non seulement non locaux en temps, mais aussi non locaux en espace.

En conséquence, le problème initial (1.16) en une dimension d'espace posé sur l'espace tout entier est approché par

$$\begin{cases} i\partial_t u + \partial_x^2 u = 0, & (x, t) \in \Omega_i \times \mathbb{R}^{*+}, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \Omega_i, \\ \partial_n u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u = 0, & (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}^{*+}. \end{cases} \quad (1.22)$$

Formellement, on a factorisé l'opérateur $i\partial_t + \partial_x^2$ [BP] sous la forme du produit $(\partial_x - e^{-i\pi/4}\sqrt{\partial_t})(\partial_x + e^{-i\pi/4}\sqrt{\partial_t})$, définissant ainsi deux opérateurs modélisant respectivement les ondes «entrantes» et les ondes «sortantes». La méthode décrite ici est assez classique et la généralisation à des dimensions d'espace supérieures suit la même démarche, la difficulté majeure étant l'utilisation du calcul pseudo-différentiel.

Remarque 1.3.1. 1. *En utilisant le changement de jauge (1.17), la condition aux limites pour (1.15) avec un potentiel dépendant du temps devient*

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}e^{-i\mathbb{V}(t)}\partial_t^{1/2}(e^{i\mathbb{V}(t)}u) = 0, \quad (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}^{*+}, \quad (1.23)$$

où $\mathbb{V}(t)$ est défini par $\mathbb{V}(t) = \int_0^t V(s)ds$.

2. *L'hypothèse sur le support compact de la donnée initiale peut être levée. Il suffit en effet lors de la transformée de Laplace de l'équation (1.16) de prendre en compte les termes résiduels au bord [ArE].*
3. *Dans le cadre des semi-conducteurs, il peut être intéressant de simuler l'injection d'électrons dans la zone de calcul à partir de réservoirs [Arn, BAP]. La condition aux limites n'est alors plus homogène et il faut ajouter l'onde incidente $u^{\text{inc}}(x, t)$. La condition aux limites non homogènes est ainsi donnée par*

$$\partial_{\mathbf{n}}(u - u^{\text{inc}}) + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}(u - u^{\text{inc}}) = 0, \quad (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}^{*+}.$$

L'ensemble des travaux présentés dans cette partie est issue d'une collaboration débutée en 1998 avec X. Antoine (MIP). Nous avons tenté de répondre aux deux objectifs de la problématique : détermination des conditions aux limites et leur traitement numérique. La détermination des conditions artificielles a été menée pour l'équation de Schrödinger en dimension 2 et pour l'équation de Schrödinger non linéaire cubique (en collaboration avec S. Descombes (ENS Lyon)). Un nouveau type d'approximation numérique des conditions (1.21) a été réalisée, puis leur utilisation a été généralisée à la dimension 2 (en collaboration avec V. Mouysset (MIP)) et à l'équation de Schrödinger non linéaire.

1.3.1 Approximation des conditions aux limites transparentes pour l'équation de Schrödinger linéaire monodimensionnelle [9]

La résolution numérique de l'équation (1.22) nécessite la construction d'un schéma numérique réalisant une approximation de l'opérateur intégral convolutif non local $\partial_t^{1/2}$ qui soit stable. Cette condition de stabilité est liée à l'élaboration d'une méthode numérique qui permette à l'énergie de décroître et cela sans contrainte.

Plusieurs auteurs ont contribué à l'élaboration de différents types de discrétisation de l'opérateur Dirichlet-Neumann (1.21). Ces approches sont résumées dans la table 1.1. La première approche consiste à discrétiser la condition aux limites analytique.

Approche continue
Formule de quadrature [Ma, Pa, BP]
Approximation de la racine carrée [Di, FV, Sze]
Approche discrète ou semi-discrète
Arguments d'analyse complexe pour le θ -schéma [SD, SY]
Transformation en $\mathcal{Z}$ [ArE]

Table 1.1: Différentes approches d'approximation de la condition aux limites

Dans [BP], Baskakov et Popov appliquent une formule de quadrature pour discrétiser l'opérateur fractionnaire continu. Ce type d'approximations conduit *in-fine* à des problèmes où une condition de stabilité est nécessaire [Ma]. Une seconde idée est de revenir à l'expression (1.19) de l'opérateur Λ en variable de Laplace et de chercher une suite d'opérateurs locaux dont le symbole approche le symbole de Λ . Cette idée a d'abord été mise en oeuvre par Di Menza [Di], puis reprise récemment dans [Sze]. L'avantage d'une telle approche est de construire des approximations de l'opérateur convolutif qui soient locales. Le coût de calcul est ainsi réduit. La stabilité de ces approximations n'est cependant pas analysée. La seconde approche consiste non plus à discrétiser la condition transparente mais à construire cette condition pour le schéma considéré. C'est l'approche suivie par Schmidt et Deuffhard [SD, SY] pour la version semi-discrète du θ -schéma ou encore d'Arnold et Ehrhardt [ArE] qui construisent un opérateur discret transparent pour la version totalement discrétisée du schéma de Crank-Nicolson. Ces deux approches conduisent évidemment à des schémas consistants et inconditionnellement stables.

Dans [9], nous utilisons plutôt une approche continue. Cette méthode permet en fait de faire le lien entre l'approche continue et l'approche discrète. Nous retrouvons en effet les quadratures établies dans [SD] en suivant une méthodologie complètement différente. Pour cela, nous utilisons une formulation équivalente de la condition transparente (1.21) exprimée maintenant avec l'opérateur Neumann-Dirichlet (ND)

$$u + e^{i\pi/4} I_t^{1/2} \partial_{\mathbf{n}} u = 0, \quad (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}^{*+}, \quad (1.24)$$

où l'intégrale fractionnaire d'ordre $1/2$ est donnée par la représentation intégrale

$$I_t^{1/2} f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{f(s)}{\sqrt{t-s}} ds. \quad (1.25)$$

Sous l'hypothèse $u_0 \in L^2(\Omega_i)$ et en utilisant les propriétés de dissipativité des opérateurs (1.20) et (1.25), nous montrons que le problème aux limites d'évolution (1.22) avec la condition transparente (1.21) ou (1.24) admet une unique solution qui satisfait l'inégalité d'énergie

$$\|u(t)\|_{L^2(\Omega_i)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega_i)}, \quad t \in \mathbb{R}^{+*}.$$

Cette propriété de dissipativité de l'énergie est primordiale et doit évidemment rester vérifiée au niveau discret.

Pour obtenir une approximation stable de (1.21) ou (1.24), nous utilisons le principe des images [DJ]. Nous montrons que si u est solution du problème

$$\begin{cases} (i\partial_t + \partial_x^2)u = 0, & \text{pour } x < x_r, t > 0, \\ u(x_r, t) + e^{i\pi/4} I_t^{1/2} \partial_{\mathbf{n}} u(x_r, t) = 0, \\ u(x, 0) = u_0(x), \end{cases}$$

alors, la solution v du problème adjoint

$$\begin{cases} (i\partial_t + \partial_x^2)v = 2\partial_{\mathbf{n}} u(x_r, t) \delta_{x_r}, & (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{*+}, \\ v(x, 0) = 0, & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (1.26)$$

vérifie

$$v(x_r, t) = -e^{i\pi/4} I_t^{1/2} \partial_{\mathbf{n}} u(x_r, t) = u(x_r, t).$$

Ainsi, la solution du problème de Cauchy (1.26) donne directement la donnée de Dirichlet $u(x_r, t)$ à la frontière $x = x_r$ et fournit donc la condition aux limites. Afin de résoudre numériquement (1.26), nous utilisons le schéma de Crank-Nicolson semi-discret en temps. L'équation différentielle ordinaire résultante est résolue par transformée de Fourier fournissant ainsi une quadrature naturelle explicite semi-discrete en temps des opérateurs d'intégration fractionnaire $I_t^{1/2}$ et de dérivation fractionnaire $\partial_t^{1/2}$ consistante avec le schéma de Crank-Nicolson. L'équation de Schrödinger linéaire posée sur Ω_i avec la condition aux limites (1.21) ou (1.24) est donc approchée par les schémas décrits dans la table 1.2. Ces deux schémas sont inconditionnellement stables au sens de la norme $\|\cdot\|_{L^2(\Omega_i)}$. De plus, comme dans le cas continu, l'énergie est bien dissipée et nous avons

$$\|u^{N+1}\|_{L^2(\Omega_i)} < \|u_0\|_{L^2(\Omega_i)}, \quad \forall N > 0.$$

Remarque 1.3.2. *De manière continue, on peut montrer [Za] que la composition de deux intégrales fractionnaires conduit à l'intégrale classique, soit $I_t(f) = I_t^{1/2}(I_t^{1/2}f)$. Nous montrons, en utilisant la même remarque, que la double composition de l'approximation de l'opérateur $I_t^{1/2}$ conduit à la formule de quadrature des trapèzes.*

Nous comparons enfin dans une dernière partie ces différents schémas avec les schémas énumérés dans la table 1.1. Il ressort de cette étude que le schéma avec condition de type (DN) donne des résultats beaucoup plus précis que celui utilisant le schéma (ND).

(ND)
$\begin{cases} i \frac{u^{n+1} - u^n}{\delta t} + \partial_x^2 \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) = 0, & \forall x \in \Omega_i, \\ u^{n+1} = -e^{i\pi/4} \frac{\sqrt{2\delta t}}{2} \sum_{k=0}^{n+1} \alpha_k \partial_{\mathbf{n}} u^{n+1-k}, & \forall x \in \Gamma, \\ u^0 = u_0, & \forall x \in \Omega_i, \\ (\alpha_0, \alpha_1, \dots) = (1, 1, 1/2, 1/2, 3/8, 3/8, \dots), \end{cases}$
(DN)
$\begin{cases} i \frac{u^{n+1} - u^n}{\delta t} + \partial_x^2 \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) = 0, & \forall x \in \Omega_i, \\ \partial_{\mathbf{n}} u^{n+1} = -e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\delta t}} \sum_{k=0}^{n+1} \beta_k u^{n+1-k}, & \forall x \in \Gamma, \\ u^0 = u_0, & \forall x \in \Omega_i, \\ \beta_k = (-1)^k \alpha_k, & k \in \mathbb{N}, \end{cases}$

Table 1.2: Approximation de l'équation de Schrödinger linéaire avec différentes formulations de la (CLT)

1.3.2 Construction de conditions aux limites absorbantes pour l'équation de Schrödinger linéaire bidimensionnelle [11], [12]

La condition aux limites exacte pour (1.16) met en jeu un opérateur de type convolutif non local en temps. Elle peut être approchée par plusieurs types de discrétisations restant pour la plupart non locales. Les études concernant la construction de conditions aux limites exactes en dimension deux ont reçu peu d'attention et peu de développements ont été réalisés. L'analyse a souvent été seulement limitée au cas de géométries canoniques telles que le demi-plan ou les cas circulaires [Sc, HH]. Dans ces cadres canoniques, l'analyse peut être réalisée en reproduisant la méthode utilisée en une dimension par Laplace. Malheureusement, contrairement à la dimension un, ces conditions sont à la fois non locales en temps et en espace et conduisent donc à des coûts de calcul prohibitifs. Des discrétisations complètement locales ont été mises en oeuvre par plusieurs auteurs [Di, FV, Sze] dans le cas du demi-espace. Ces conditions ont montré leur efficacité dans ce cadre, mais génèrent cependant des réflexions parasites à la frontière qui peuvent être dues à la présence de singularités dans la géométrie du domaine de calcul (généralement un domaine rectangulaire). Les frontières fictives de type carré ou rectangle sont dictées par des schémas numériques de types différences finies. Or, la nature des solutions de (1.16) n'impose pas ce choix. Nous avons donc proposé dans [11] et dans [12] une

approche alternative qui permet de construire une hiérarchie de conditions aux limites absorbantes pour des domaines convexes quelconques. Ces conditions restent non locales en temps mais présentent l'intérêt d'être locales en espace. Ce point est essentiel d'un point de vue pratique puisque l'approximation du problème par une méthode d'éléments finis par exemple conduira à la résolution d'un système linéaire défini par un système creux.

Nous considérons donc l'équation de Schrödinger linéaire (1.16) en dimension deux et cherchons à exprimer une condition aux limites sur la frontière Γ du domaine de calcul $\Omega_i \subset \mathbb{R}^2$. Comme en dimension un, l'opérateur exact $\mathcal{B}^+(x, \partial_x, \partial_t)$ peut être exprimé en fonction de l'opérateur pseudo-différentiel non local Dirichlet-Neumann $\Lambda(x, t, \partial_t)$ sous la forme

$$\mathcal{B}^+(x, \partial_x, \partial_t)u(x, t) \equiv \partial_{\mathbf{n}}u(x, t) + i\Lambda u(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}_t^{*+},$$

où $\mathbf{n}$ désigne la normale unitaire sortante au domaine Ω_i . Nous construisons donc le problème aux limites artificiel suivant

$$\begin{cases} L(\partial_t, \partial_x)u \equiv i\partial_t u + \Delta u = 0, & (x, t) \in \Omega_i \times \mathbb{R}^{*+}, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \Omega_i, \\ \partial_{\mathbf{n}}u(x, t) + i\Lambda u(x, t) = 0, & (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}_t^{*+}. \end{cases}$$

L'approche suivie consiste à approcher l'opérateur exact caractérisé par Λ par une condition aux limites non réfléchissantes. Pour cela, nous construisons l'opérateur transparent $\mathcal{T}^+(x, \partial_x, \partial_t)$ qui contrairement à $\mathcal{B}^+(x, \partial_x, \partial_t)$ n'agit que sur une bande de fréquences. Nous cherchons ainsi à filtrer les ondes rasantes et les ondes évanescentes pour ne garder que la partie propagative de la solution. Nous obtenons la condition aux limites transparentes

$$\mathcal{T}^+(x, \partial_x, \partial_t)\tilde{u}(x, t) \equiv (\partial_{\mathbf{n}} + i\tilde{\Lambda})\tilde{u}(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}_t^{*+},$$

où $\tilde{\Lambda}$ est un opérateur approchant Λ et $\tilde{u}$ est une approximation de u dans une bande de fréquences. L'opérateur transparent, n'agissant plus sur toutes les fréquences, n'est plus un opérateur pseudo-différentiel classique mais un opérateur micro-différentiel. Nous généralisons ici l'approche développée par Engquist et Majda pour l'équation des ondes [EM1, EM2]. Cette méthode utilise la théorie de la réflexion des singularités pour construire une condition transparente non locale qui reproduit les singularités de la solution. Néanmoins, les dérivées spatiales et temporelles dans l'opérateur L de Schrödinger ne portent pas la même homogénéité. Nous utilisons donc le calcul symbolique M -quasi homogène de Lascar [La] qui permet d'étendre la notion d'opérateurs pseudo-différentiel aux cas des opérateurs à symboles inhomogènes. Nous définissons ainsi l'ensemble des fonctions M -homogènes $\mathbb{H}_M^\mu$

$$\forall \mu > 0, \forall (s, t, \xi, \tau) \in X \times \mathbb{R}^2, \quad \mathbb{H}_M^\mu(s, t, \mu\xi, \mu^2\tau) = \mu \mathbb{H}_M^\mu(s, t, \xi, \tau),$$

où $X \subset \mathbb{R}^2$ et $M = (1, 2)$. Alors, une fonction f est M -quasi homogène de degré m si $f \circ \mathbb{H}_M^\mu = \mu^m f$, $\forall \mu > 0$ et un sous-ensemble $\mathcal{C} \subset X \times \mathbb{R}^2$ est un M -cône s'il est stable par les dilatations $\mathbb{H}_M^\mu$, $\mu > 0$. Un opérateur pseudo-différentiel sera dit M -quasi homogène si son symbole total a vérifie

$$a(s, t, \xi, \tau) \sim \sum_{j=-m}^{+\infty} a_{-j}(s, t, \xi, \tau),$$

où $a_{-j}(s, t, \xi, \tau)$ sont M -quasi homogènes de degré $-j$. On écrit $a \in S_M^m$ et $A \in OPS_M^m$.

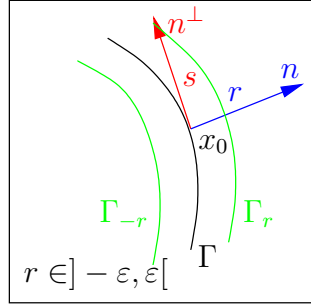


Figure 1.2: Voisinage tubulaire de la frontière Γ

Muni du M -calcul, nous nous plaçons dans un voisinage tubulaire de la frontière Γ (voir FIG. 1.2) où l'opérateur L s'exprime en coordonnées locales généralisées

$$L(r, s, \partial_r, \partial_s, \partial_t) = i\partial_t + \partial_r^2 + \kappa_r \partial_r + h^{-1} \partial_s (h^{-1} \partial_s),$$

avec $h(r, s) = 1 + r\kappa$ et $\kappa_r = h^{-1}\kappa$ désignant la courbure sur la surface parallèle Γ_r à Γ . Soient alors ξ et τ les covariables respectives de l'abscisse curviligne s et du temps t . En utilisant la théorie de la propagation des singularités pour les opérateurs pseudo-différentiels de Lascar et Boutet de Monvel [BdM], nous montrons par le théorème de factorisation de Nirenberg [Ni] qu'il existe deux opérateurs r -réguliers $\Lambda^\pm \in OPS_M^1$ tels que

$$L = (\partial_r + i\Lambda^-(r, s, \partial_s, \partial_t))(\partial_r + i\Lambda^+(r, s, \partial_s, \partial_t)) + R$$

où R est un opérateur pseudo-différentiel de degré $-\infty$. Le symbole principal de $\Lambda^\pm$ est $\lambda_1^\pm = \mp(-(h^{-2}\xi^2 + \tau))^{1/2} \in S_M^1$ dans le cône M -quasi hyperbolique $\mathcal{H}$ sous l'hypothèse que Ω_i est convexe. Le cône M -quasi hyperbolique $\mathcal{H}$ contient la partie propagative de l'onde. Ce théorème permet de développer un algorithme récursif de détermination des termes du développement asymptotique $\lambda^\pm \sim \sum_{j=-1}^{+\infty} \lambda_{-j}^\pm$. On

peut ainsi reconstruire le développement asymptotique du symbole de $\tilde{\Lambda}^+ = \Lambda^+_{|r=0}$. Cependant, cet opérateur micro-différentiel reste non local en temps et en espace et met en jeu une sommation infinie. Nous obtenons la localisation en espace sous l'hypothèse **haute fréquence** $\tau \gg \xi^2$. Alors, la condition aux limites absorbante d'ordre $(m+2)/2$ est

$$(\partial_{\mathbf{n}} + iOp(\sum_{j=-1}^m (\widetilde{\lambda_{-j}})_{(m+2)}))v = 0 \text{ sur } \Gamma \times \mathbb{R}^{+*},$$

où $(\widetilde{\lambda_{-j}})_{(m+2)}$ est le développement de Taylor par rapport au petit paramètre τ^{-1} tronqué à $\tau^{-(m+2)/2}$. Nous obtenons ainsi le résultat suivant

Proposition 1.3.1. *Soit Ω_i un domaine de $\mathbb{R}^2$ convexe. L'équation de Schrödinger avec une condition aux limites artificielle de type DN d'ordre $m/2$, avec $m \in \{1, \dots, 4\}$, est définie par le problème de Cauchy*

$$(DN^{m/2}) \quad \begin{cases} (i\partial_t + \Delta)u = 0, & (x, t) \in \Omega_i \times \mathbb{R}_t^+, \\ \partial_{\mathbf{n}}u + T_{m/2}u = 0, & (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}_t^+, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \Omega, \end{cases}$$

où $T_{m/2}$, $m \in \{1, \dots, 4\}$, sont des opérateurs pseudo-différentiels en temps et différentiel en espace donnés par

$$\begin{aligned} T_{1/2}u &= e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u, & T_1u &= T_{1/2}u + \frac{\kappa}{2}u, & \text{sur } \Gamma \times \mathbb{R}_t^+, \\ T_{3/2}u &= T_1u - e^{i\pi/4} \left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{1}{2} \Delta_\Gamma \right) I_t^{1/2} u, & & \text{sur } \Gamma \times \mathbb{R}_t^+, \\ T_2u &= T_{3/2}u + i \left(\frac{\kappa^3}{8} + \frac{1}{2} \partial_s(\kappa \partial_s) + \frac{\Delta_\Gamma \kappa}{8} \right) I_t u, & & \text{sur } \Gamma \times \mathbb{R}_t^+, \end{aligned}$$

Ci dessus, s désigne l'abscisse curviligne et $\kappa(s)$ la courbure. Nous notons $\Delta_\Gamma = \partial_s^2$ l'opérateur de Laplace-Beltrami sur Γ . Ces conditions sont symétriques au sens du produit scalaire de $L^2(\Gamma)$.

Remarque 1.3.3. *Ce travail a été récemment étendu au cas des dimensions supérieures $d \geq 3$ par J. Szeftel [Sze] qui a aussi démontré le caractère bien posé du problème de Cauchy.*

Le développement réalisé ci-dessus peut être repris de manière explicite pour le cas d'une frontière circulaire [12]. Nous réécrivons pour cela l'équation de Schrödinger linéaire en coordonnées polaires (r, θ) puis appliquons la transformée de Laplace en temps. L'équation différentielle ordinaire par rapport à r est explicite. Comme la solution doit être continue et 2π -périodique par rapport à θ , on peut chercher la

solution sous forme d'une série de Fourier, dont les coefficients sont exprimés en fonction des fonctions de Hankel d'ordre m . Nous obtenons ainsi une hiérarchie de conditions aux limites qu'il est possible de localiser en espace en faisant l'hypothèse de haute fréquence. La hiérarchie de conditions aux limites absorbantes devient ainsi pour un cercle de rayon R pour des points sur $C_R \times \mathbb{R}^{*+}$

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u &= 0, \\ \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u + \frac{1}{2R} u &= 0, \\ \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u + \frac{1}{2R} u - e^{i\pi/4} \left(\frac{1}{8R^2} + \frac{1}{2R^2} \partial_\theta^2 \right) I_t^{1/2} u &= 0 \\ \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u + \frac{1}{2R} u - e^{i\pi/4} \left(\frac{1}{8R^2} + \frac{1}{2R^2} \partial_\theta^2 \right) I_t^{1/2} u + \frac{i}{R} \left(\frac{1}{8R^2} + \frac{1}{2R^2} \partial_\theta^2 \right) I_t u &= 0. \end{aligned}$$

On reconnaît aisément la similitude des conditions générales de la proposition 1.3.1 et de celles pour un disque.

1.3.3 Résolution numérique de l'équation de Schrödinger linéaire bidimensionnelle avec conditions aux limites absorbantes [13]

Nous nous intéressons dans cette partie à la résolution numérique des systèmes $(DN^{m/2})$. Comme dans le cas mono dimensionnel, l'énergie $\|u(t)\|_{L^2\Omega_i}$ est dissipée au cours du temps, la démonstration étant cependant plus compliquée. Il faut en effet utiliser fortement la détermination des conditions aux limites dans le M -cône hyperbolique. L'hypothèse $\tau + \xi^2 < 0$ est une hypothèse géométrique cruciale dans les estimations pour montrer les propriétés de dissipation des opérateurs $T_{m/2}$. Cette propriété de dissipativité a guidé la construction du schéma numérique. Il faut en effet, comme en dimension un, construire un schéma inconditionnellement stable qui vérifie cette propriété.

Nous définissons la convolution discrète $\star$ de deux suites complexes $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(g^n)_{n \in \mathbb{N}}$ par la relation $(f_n \star g^n)_n = \sum_{k=0}^n f_k g^{n-k}$. Nous réutilisons le schéma semi-discret de Crank-Nicolson et les approximations des opérateurs d'intégration et d'intégration et de dérivation fractionnaires définis dans [9].

$$I_t f(t_n) \approx \frac{\delta t}{2} (\delta_n \star f^n)_n, \quad I_t^{1/2} f(t_n) \approx \frac{\sqrt{2\delta t}}{2} (\alpha_n \star f^n)_n, \quad \partial_t^{1/2} f(t_n) \approx \frac{2}{\sqrt{2\delta t}} (\beta_n \star f^n)_n, \quad (1.27)$$

où $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}}$, $(\beta_n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(\delta_n)_{n \in \mathbb{N}}$ désignent les suites définies par

$$\begin{cases} (\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \dots) = (1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \dots), \\ \beta_n = (-1)^n \alpha_n, \quad \forall n \geq 0, \\ (\delta_0, \delta_1, \delta_2, \delta_3, \dots) = (1, 2, 2, 2, \dots). \end{cases}$$

Nous définissons ainsi les schémas numériques $(SD^{m/2})$, $m \in \{1, \dots, 4\}$, versions semi-discrétisées de $(DN^{m/2})$, donnés pour $n \in [0, N]$ par

$$(SD^{m/2}) \begin{cases} i \frac{u^{n+1} - u^n}{\delta t} + \Delta u^{n+\frac{1}{2}} = 0, & x \in \Omega_i, \\ \partial_{\mathbf{n}} u^{n+\frac{1}{2}} + T_{m/2}^{sd} u^{n+\frac{1}{2}} = 0, & x \in \Gamma, \\ u^0 = u_0, & x \in \Omega_i, \end{cases}$$

où N est le nombre d'intervalles de temps, $N\delta t = T$, et $u^{n+\frac{1}{2}} = \frac{u^{n+1} + u^n}{2}$. Nous avons défini $T_{m/2}^{sd}$ comme les approximations semi-discrètes des opérateurs artificiels continus $T_{m/2}$

$$\begin{aligned} T_{1/2}^{sd} u^{n+\frac{1}{2}} &= e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\delta t}} a^{n+\frac{1}{2}}, \quad n \in [0, N], \\ T_1^{sd} u^{n+\frac{1}{2}} &= T_{1/2}^{sd} u^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\kappa}{2} u^{n+\frac{1}{2}}, \quad n \in [0, N], \\ T_{3/2}^{sd} u^{n+\frac{1}{2}} &= T_1^{sd} u^{n+\frac{1}{2}} - e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\delta t}{2}} \left(\frac{\kappa^2 b_0^{n+\frac{1}{2}}}{8} - \frac{b_2^{n+\frac{1}{2}}}{2} \right), \quad n \in [0, N], \\ T_2^{sd} u^{n+\frac{1}{2}} &= T_{3/2}^{sd} u^{n+\frac{1}{2}} + i \frac{\delta t}{2} \left(\left(\frac{\kappa^3}{8} + \frac{\Delta_{\Gamma} \kappa}{8} \right) d_0^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \partial_s (\kappa d_1^{n+\frac{1}{2}}) \right), \quad n \in [0, N]. \end{aligned}$$

avec

$$a^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_{n+1} \star u^{n+1} + \beta_n \star u^n}{2}, \quad b_{\gamma}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\alpha_{n+1} \star \partial_s^{\gamma} u^{n+1} + \alpha_n \star \partial_s^{\gamma} u^n}{2}, \quad \gamma \in \{0, 1, 2\},$$

et

$$d_{\gamma}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\delta_{n+1} \star \partial_s^{\gamma} u^{n+1} + \delta_n \star \partial_s^{\gamma} u^n}{2}, \quad \gamma \in \{0, 1\}.$$

Sous une hypothèse semi-discrète équivalente à l'hypothèse définissant le M -cône quasi hyperbolique, nous démontrons que ces schémas sont inconditionnellement stables. Leurs discrétisations spatiales reposent sur une approximation éléments finis $\mathcal{P}^1$ de la formulation faible du problème $(SD^{m/2})$

$$i \int_{\Omega_i} \frac{u^{n+1} - u^n}{\delta t} \varphi d\Omega_i - \int_{\Gamma} T_{m/2}^{sd} u^{n+\frac{1}{2}} \varphi d\Gamma - \int_{\Omega_i} \nabla u^{n+\frac{1}{2}} \cdot \nabla \varphi d\Omega_i = 0, \quad \forall \varphi \in H^1(\Omega_i).$$

Des expériences numériques sont menées pour différentes géométries et permettent de vérifier l'efficacité et l'ordonnancement de la hiérarchie de conditions aux limites. Nous regardons par exemple l'évolution d'une gaussienne dans une domaine convexe de frontière parabolique (voir figure 1.3).

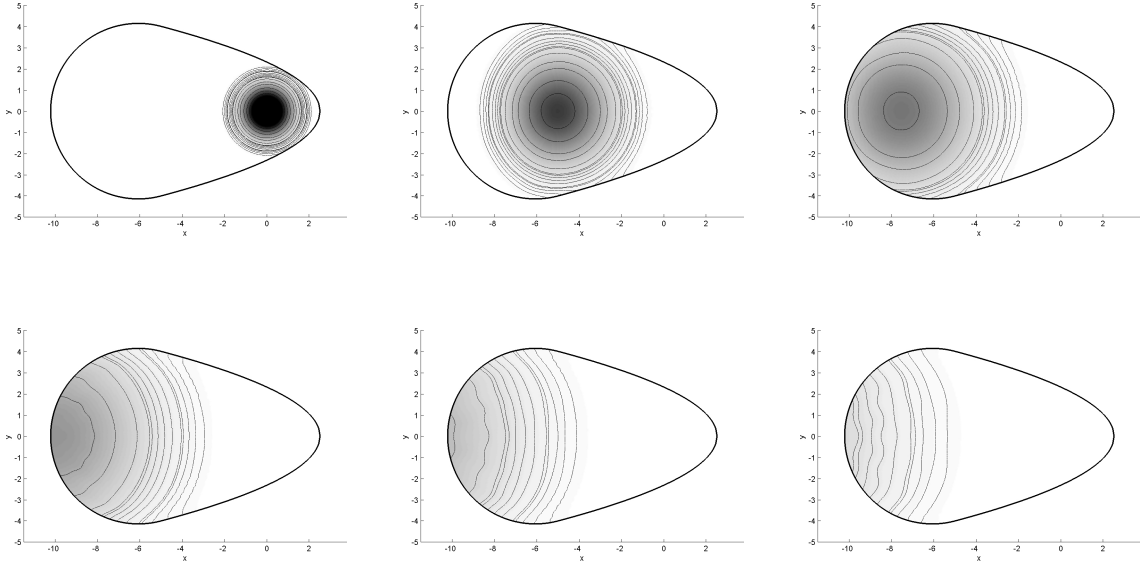


Figure 1.3: Evolution de la solution approchée aux temps $t = 0$, $t = 0.5$, $t = 0.75$, $t = 1$, $t = 1.25$ et $t = 1.5$ en utilisant la condition artificielle du second ordre T_2^{sd} .

1.3.4 Conditions aux limites absorbantes pour l'équation de Schrödinger non linéaire cubique monodimensionnelle [14]

Le cas linéaire étant mieux maîtrisé, nous nous sommes intéressés, en collaboration avec S. Descombes (ENS Lyon), au développement de techniques proches dans le cas où l'équation de Schrödinger est perturbée par une non linéarité (notamment de type cubique $|u|^2u$) dans le cas unidimensionnel. L'idée naturelle consiste à considérer la non linéarité comme un potentiel, à construire des conditions aux limites artificielles pour ce problème puis à revenir au problème non linéaire en remplaçant formellement le potentiel par la non linéarité. Comme nous l'avons fait remarquer en introduction, dans le cas où le potentiel V pour (1.15) ne dépend que du temps, un simple changement de jauge permet à partir des conditions aux limites pour (1.16) de définir les conditions (1.23) pour (1.15). En suivant l'idée précédente, les conditions aux limites formelles deviendraient

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}e^{-i\mathbb{U}(t)}\partial_t^{1/2}(e^{i\mathbb{U}(t)}u) = 0, \quad (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}^{*+}, \quad (1.28)$$

où $\mathbb{U}(t)$ est défini par $\mathbb{U}(t) = - \int_0^t q|u|^2(x, s)ds$.

Evidemment, cette analyse est purement formelle et ne peut en aucun cas justifier ces conditions. Cependant, nous pouvons regarder l'influence du changement de jauge dans le cas où le potentiel dépend effectivement de l'espace. Soit alors $v(x, t) = u(x, t) \exp(i\mathcal{V}(x, t))$ avec $\mathcal{V}(x, t) = \int_0^t V(x, s)ds$. Les dérivées temporelles et spatiales de v sont données en terme de dérivées de u par

$$\begin{aligned} i\partial_t v &= (i\partial_t u - Vu)e^{i\mathcal{V}}, \\ \partial_x^2 v &= (\partial_x^2 u + 2i\partial_x u \partial_x \mathcal{V} + i\partial_x^2 \mathcal{V} u - (\partial_x \mathcal{V})^2 u) e^{i\mathcal{V}}. \end{aligned}$$

En conséquence, la fonction u vérifie l'équation de Schrödinger suivante

$$L(x, t, \partial_x, \partial_t)u = i\partial_t u + \partial_x^2 u + A\partial_x u + Bu = 0,$$

où nous avons défini les deux fonctions A et B par les relations $A = 2i\partial_x \mathcal{V}$ et $B = (i\partial_x^2 \mathcal{V} - (\partial_x \mathcal{V})^2)$. Pour un potentiel qui ne dépend que de la variable de temps t , les opérateurs A et B disparaissent et l'approche coïncide avec le cas précédent.

On reproduit maintenant l'analyse décrite dans la sous-section 1.3.2 pour le cas bidimensionnel. Le même calcul pseudo-différentiel est donc utilisé mais où la covariable ξ a disparu. Le théorème de factorisation de Nirenberg appliqué à L permet d'obtenir une formule de récurrence pour la construction des symboles du développement asymptotique du symbole total de L . En effet, il existe deux opérateurs pseudo-différentiels $\Lambda^\pm = \Lambda^\pm(x, t, \partial_t)$, réguliers par rapport à la variable d'espace x et tels que

$$L = (\partial_x + i\Lambda^-)(\partial_x + i\Lambda^+) + R,$$

où R est un opérateur régularisant. Le développement de cette factorisation permet d'identifier les opérateurs A et B . On a ainsi

$$(\partial_x + i\Lambda^-)(\partial_x + i\Lambda^+) = \partial_x^2 + i(\Lambda^+ + \Lambda^-)\partial_x + iOp(\partial_x \lambda^+) - \Lambda^- \Lambda^+,$$

et après identification

$$\begin{aligned} i(\Lambda^+ + \Lambda^-) &= A, \\ iOp(\partial_x \lambda^+) - \Lambda^- \Lambda^+ &= i\partial_t + B. \end{aligned}$$

La condition, pour avoir une onde réfléchie «minimale», est donné par la condition aux limites transparentes $(\partial_{\mathbf{n}} + i\Lambda^+)v = 0$ sur $\Gamma \times \mathbb{R}_t^+$. Comme l'opérateur Λ^+ a un développement infini en symboles inhomogènes, on choisit d'approcher cette condition en ne retenant que les M premiers termes ce qui conduit à la condition

aux limites absorbantes définie à l'aide de l'approximation $\Lambda_{M/2}^+$ donnée par $\Lambda_{M/2}^+ = iOp(\sum_{j=0}^{M-1} \lambda_{1/2-j/2}^+)$. Alors, la condition aux limites absorbante est

$$\partial_{\mathbf{n}} u + e^{i\mathcal{V}} \Lambda_{M/2}^+(e^{-i\mathcal{V}} u) = 0, \text{ sur } \Gamma \times \mathbb{R}_t^+.$$

Les conditions du premier et du second ordre sont ainsi données par

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{i\mathcal{V}} \partial_t^{1/2}(e^{-i\mathcal{V}} u) &= 0, \text{ sur } \Gamma \times \mathbb{R}_t^+, \\ \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{i\mathcal{V}} \partial_t^{1/2}(e^{-i\mathcal{V}} u) + i\frac{\partial_x V}{4} e^{i\mathcal{V}} I_t(e^{-i\mathcal{V}} u) &= 0, \text{ sur } \Gamma \times \mathbb{R}_t^+. \end{aligned}$$

Il est maintenant possible d'un point de vue formel de remplacer le potentiel V par $-q|u|^2$ et nous obtenons les deux Conditions Nonlinéaires Absorbantes d'ordre $M/2$ (NLABC $^{M/2}$)

$$\partial_{\mathbf{n}} u + \Lambda_{M/2}^{NLS}(x, t, \partial_x, \partial_t, |u|) u = 0, \text{ sur } \Gamma \times \mathbb{R}_t^+,$$

où les opérateurs non linéaires sont définis par

$$\begin{aligned} \Lambda_1^{NLS}(x, t, \partial_x, \partial_t, |u|) &= e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{i\mathbb{U}} \partial_t^{1/2}(e^{-i\mathbb{U}} u), \\ \Lambda_2^{NLS}(x, t, \partial_x, \partial_t, |u|) &= \Lambda_1^{NLS}(x, t, \partial_x, \partial_t, |u|) + i\frac{q}{4} \partial_{\mathbf{n}}(|u|^2) e^{i\mathbb{U}} I_t(e^{-i\mathbb{U}} u). \end{aligned}$$

La condition d'ordre 1 est exactement la condition formelle (1.28). La seconde condition d'ordre supérieur comporte un terme correctif.

Nous montrons que le système constitué de l'équation de Schrödinger non linéaire sur un domaine borné et de ces conditions aux limites dissipe bien l'énergie pour la première condition. Cette démonstration ne s'étend pas à la deuxième condition car il est impossible de donner un signe à la quantité $\partial_{\mathbf{n}}(|u|^2)$.

Nous utilisons alors les formules de quadrature définies dans les sous-sections précédentes pour traiter numériquement ces problèmes aux limites. Le schéma numérique utilisé est le schéma de Dúran-Sanz Serna [DSS] qui permet d'obtenir des formulations symétriques des équations. A l'aide de discrétisations symétrisées des conditions aux limites, on peut ainsi montrer la dissipativité discrète de l'énergie et ainsi l'inconditionnelle stabilité. Finalement, des expériences numériques permettent de valider cette approche. Elles montrent que les conditions non linéaires obtenues sont très performantes pour des solutions hautes-fréquences, et en particulier pour des solitons rapides.

Remarque 1.3.4. Dans [Sze], J. Szeftel a appliqué la théorie des opérateurs para-différentiels développée par J.M. Bony [Bo]. Les conditions aux limites sont très différentes. Des comparaisons entre les conditions aux limites sont en cours.

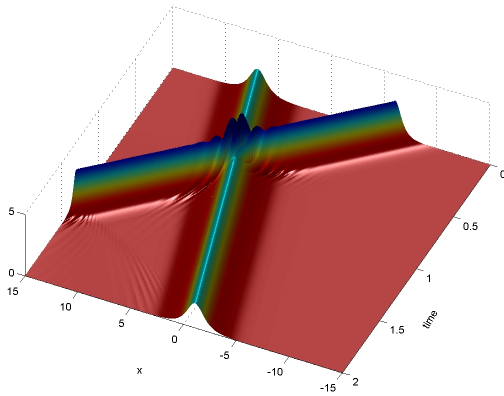


Figure 1.4: Interaction de solitons lent et rapide avec des directions opposées.

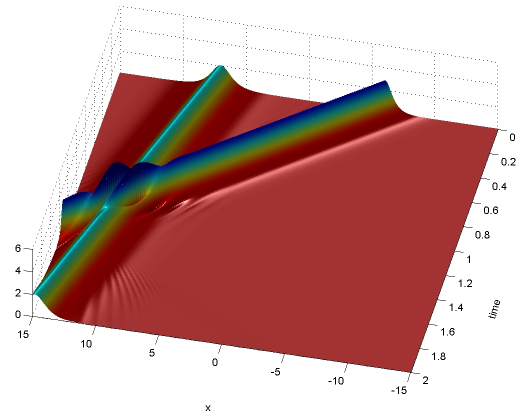


Figure 1.5: Interaction de solitons lent et rapide avec des directions identiques.

1.4 Modélisation de plasmas ionosphériques

L'atmosphère terrestre subit perpétuellement des collisions de haute énergie avec les radiations cosmiques. La source la plus importante de ces radiations pour notre planète provient du soleil par le biais du vent solaire. Ses particules interagissent avec la haute atmosphère constituée de plasma et appelée ionosphère. Elles créent des perturbations majeures dont les effets visibles les plus célèbres sont les aurores. Elles peuvent surtout perturber de manière significative les communications terre-satellites, voir même détruire ces satellites comme cela fût le cas pour la dernière éruption solaire de fin 2003. Des perturbations des communications peuvent aussi simplement être générées par l'environnement terrestre, par exemple l'électrojet équatorial ou encore le «Spread F».

Nous nous intéressons pour notre part aux instabilités qui ont lieu à des altitudes variant entre 200 km et 1000 km (région F) et à des latitudes moyennes. La génération de ces instabilités résulte de l'effet du vent de neutres. En effet, dans la basse ionosphère cohabitent espèces chargées (ions, électrons) et espèces neutres. Le vent de neutres entraîne les particules chargées par collision qui coupent alors les lignes de champ magnétique terrestre B . Un champ électrique induit E est alors immédiatement créé orthogonal à la fois au champ magnétique, mais aussi au vent de neutre. C'est **l'effet dynamo ionosphérique** [BM]. Comme la conductivité électronique est très importante le long des lignes de champ, ce champ électrique créé dans les basses couches de l'ionosphère se retrouve immédiatement «transporté» dans toutes les couches supérieures de l'ionosphère. Une instabilité de dérive de gradient, aussi

appelée instabilité en $E \times B$, apparaît comme une réponse à ce champ électrique externe. Cette instabilité a de nombreuses analogies avec l'instabilité de Rayleigh-Taylor en mécanique des fluides[Ch]. Elle produit de fortes inhomogénéités (les striations ionosphériques) qui se propagent sur des centaines de kilomètres le long des lignes de champ magnétique et durent parfois plusieurs heures (voir figure 1.6).

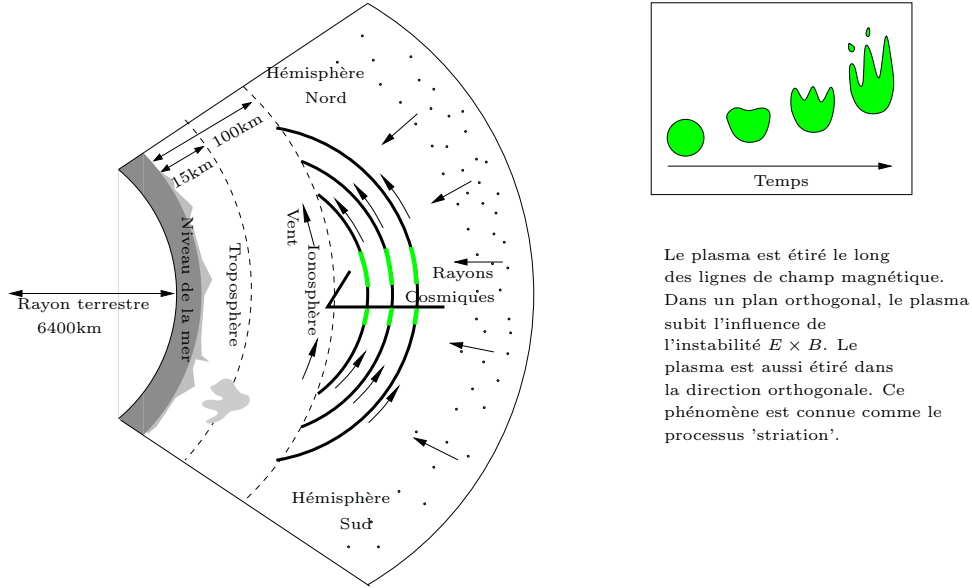


Figure 1.6: Evolution des instabilités

Mes activités de recherche concernant la modélisation des instabilités ionosphériques ont débuté en 2000 par une collaboration avec Pierre Degond dans le cadre d'un contrat avec le CEA Cesta de Bordeaux. L'ensemble des travaux, à l'exception de [17] écrit en collaboration avec R. Poncet (MIP), P. Degond(MIP) et H. Hwang (Duke University) , ont été rédigés en collaboration avec F. Deluzet (MIP), P. Degond (MIP), J. Claudel (CEA Cesta), G. Gallice (CEA Cesta) et C. Tessieras (CEA Cesta). Le premier travail [15] a permis de développer une hiérarchie de modèles permettant de rendre compte des instabilités ionosphériques de type II. Il est établi dans [16] que le modèle limite de cette hiérarchie, le modèle striation, est linéairement instable. Les techniques de modélisation $k - \epsilon$ pour la mécanique des fluides sont appliquées dans le cadre des instabilités ionosphériques pour prendre en compte la turbulence. Le modèle résultant est discrétisé puis des expériences numériques sont réalisées. L'instabilité linéaire n'entraîne pas nécessairement l'instabilité non linéaire. Dans un travail théorique [17], nous démontrons cette propriété. Enfin, nous développons dans [18] un schéma numérique dans le cadre d'un champ magnétique non uniforme.

1.4.1 Modélisation d'irrégularités du plasma ionosphérique terrestre [15]

Les irrégularités du plasma ionosphérique terrestre dans des régions de latitudes moyennes comprises entre 200 et 1000 km peuvent être modélisées par un système d'équations d'Euler pour les deux espèces chargées ions et électrons couplées à l'équation de Maxwell pour l'évolution des champs électriques et magnétiques. Dans la partie basse de l'ionosphère, la densité de particules chargées est faible et n'influence pas la dynamique des particules neutres. Ainsi, la vitesse des neutres $u_n(x, t)$ (aussi appelé vent de neutres) est supposée connue. Nous définissons $n_e(x, t)$ et $n_i(x, t)$, les densités des électrons et des ions, $u_e(x, t)$, $u_i(x, t)$, leurs vitesses, p_e , p_i , leurs pressions, $E(x, t)$, $B(x, t)$, les champs électriques et magnétiques, $\rho(x, t) = e(n_i - n_e)$ et $j(x, t) = e(n_i u_i - n_e u_e)$, la densité de charge et le courant. Ces quantités sont fonctions du vecteur position $x \in \mathbb{R}^3$ et du temps $t > 0$. En outre, nous introduisons m_e , m_i , les masses ioniques et électroniques, e , la charge élémentaire, ε_0 et μ_0 , la permittivité du vide et la perméabilité, $c = (\varepsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$ la vitesse de la lumière, qui sont des constantes physiques données. Nous devons également introduire les fréquences de collision électrons-neutres et ions-neutres ν_e , ν_i . Les collisions entre les électrons et les ions seront modélisées par le taux constant K . Le système bi-fluide isotherme ou isentropique d'Euler-Maxwell s'écrit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial n_{e,i}}{\partial t} + \nabla \cdot (n_{e,i} u_{e,i}) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (m_{e,i} n_{e,i} u_{e,i}) + \nabla \cdot (m_{e,i} n_{e,i} u_{e,i} u_{e,i}) + \nabla p_{e,i}(n_{e,i}) = \pm e n_{e,i} (E + u_{e,i} \times B) \\ \quad - \nu_{e,i} m_{e,i} n_{e,i} (u_{e,i} - u_n) - K n_e n_i (u_{e,i} - u_{i,e}), \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial E}{\partial t} - \nabla \times B = -\mu_0 j, \quad \frac{\partial B}{\partial t} + \nabla \times E = 0, \quad \nabla \cdot E = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho, \quad \nabla \cdot B = 0. \end{array} \right.$$

Nous avons remplacé les équations d'énergie par l'hypothèse que les pressions électroniques et ioniques sont des fonctions locales des densités. En fait, nous supposons à partir d'une hypothèse adiabatique que $p_{e,i} = n_{e,i} k_B T_{e,i}$, où k_B désigne la constante de Boltzmann.

Ce modèle est en fait trop coûteux pour permettre la réalisation de simulations numériques sur des échelles de temps et d'espace réalistes. En effet, nous désirons effectuer des simulations pour des bulles de plasma sur des régions dont la taille typique est de quelques centaines de kilomètres et sur des échelles de temps de l'ordre de l'heure. Afin de réduire le coût de calcul, nous étudions plusieurs régimes limites et effectuons quelques adimensionnements. Après le scaling des équations, il reste sept paramètres sans dimension, qui peuvent être combinés de plusieurs façons.

Le premier processus limite conduit au système Hall-MHD, qui est obtenu en passant à la limite dans le rapport des masses électronique et ionique, ε , et dans le rapport de la vitesse du son ionique et de la vitesse de la lumière, α , en gardant les autres paramètres finis. Dans les paramètres sans dimension apparaissant dans le système Hall-MHD, κ , le rapport de la fréquence de collision contre les neutres et de la fréquence cyclotron dans le champ magnétique terrestre, et β , la force de la perturbation magnétique auto-consistante relative au champ magnétique terrestre, tendent vers zéro plus vite que tous les autres. Un troisième paramètre, τ , joue aussi un rôle important, et est petit quand les échelles de temps caractéristiques sont grandes comparées au temps moyen de collision contre les neutres.

Deux stratégies peuvent alors être élaborées et sont résumées dans la figure 1.7.

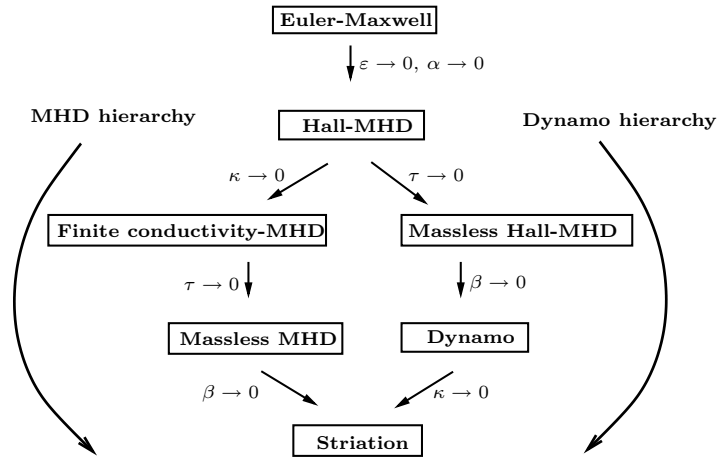


Figure 1.7: Hiérarchie des modèles ionosphériques.

La hiérarchie Dynamo est obtenue quand on prend d'abord la limite $\beta \rightarrow 0$ tandis que la hiérarchie MHD se développe dans on prend d'abord la limite $\kappa \rightarrow 0$. Cependant, la limite $\beta \rightarrow 0$ conduit à des modèles plus simples si elle est précédée par la limite $\tau \rightarrow 0$. C'est pourquoi la hiérarchie Dynamo consiste en la prise successive des limites $\tau \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow 0$ et $\kappa \rightarrow 0$, tandis que la hiérarchie MHD est obtenue par $\kappa \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$ et $\beta \rightarrow 0$.

Le modèle dynamo s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t n + \nabla \cdot (n u_i) = 0, \\ -\nabla \phi + u_{e,i} \times B = \kappa q_{e,i} [\nu_{e,i} (u_{e,i} - u_n) + \eta \nabla \log n], \\ \nabla \cdot j = 0, \quad \kappa j = n(u_i - u_e), \end{cases}$$

où $n = \lim n_e = \lim n_i$. Dans ce modèle, le champ électrique E dérive d'un potentiel électrique ϕ et B est un champ magnétique irrotationnel et à divergence nulle. Sur

l'autre branche de la hiérarchie, **le modèle Massless-MHD** prend la forme

$$\begin{cases} \partial_t n + \nabla \cdot (nu) = 0, \\ \eta \nabla n = j \times B - \nu n(u - u_n), \\ E + u \times B - \beta \kappa_{ei} K j = 0, \\ \nabla \times B = \beta j, \\ \partial_t B + \nabla \times E = 0, \quad \nabla \cdot B = 0, \end{cases}$$

où $u = \lim u_i = \lim u_e$. Contrairement au modèle dynamo qui est bien établi dans la littérature physique, le modèle Masseless-MHD n'a, à notre connaissance, pas encore été dérivé. Ses études théoriques ou numériques restent encore à développer.

Le modèle limite des deux branches de la hiérarchie, qui est à la base des études postérieures, est **le modèle striation**. Dans un premier temps, les effets de courbure liés au champ magnétique terrestre sont ignorés. Ainsi, on se place dans le système cartésien orthonormal de coordonnées $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$, où $\hat{x}_3$ est aligné avec B . Nous pouvons choisir les unités d'échelles telle que $|B| = 1$, et ainsi $B = \hat{x}_3$. Si l'on suppose que le vent de neutres est orthogonal au champ magnétique B , alors aucune quantité n'a de composantes suivant x_3 (à part B lui même) et le modèle striation est purement bidimensionnel et prend la forme

$$\partial_t n + \nabla \cdot (nu) = 0, \quad u = -\nabla \phi \times B, \quad (1.29)$$

$$-\nabla \cdot (n\nu \nabla \phi) = -\nabla \cdot J_n, \quad J_n = \nu(u_n - 2\eta\nu^{-1} \nabla \log n) \times B. \quad (1.30)$$

Le modèle striation est donc constitué d'une équation de convection pour la densité n des particules chargées et d'une équation elliptique pour le potentiel électrique ϕ .

Dans le cas où le vent de neutres n'est pas orthogonal à B ou bien que le champ magnétique B n'est pas uniforme, une expression un peu plus compliquée du modèle striation peut être développée. Il faut pour cela intégrer les quantités sur un tube de champ magnétique et introduire un nouveau jeu de coordonnées locales. Cette thématique sera développée plus en détails dans la sous-section 1.4.4.

1.4.2 Modélisation par turbulence d'instabilités du plasma ionosphérique [16]

Le modèle striation (1.29-1.30) est **linéairement instable**. En effet, d'un point de vue phénoménologique, considérons un état stationnaire consistant en une densité discontinue $n(x) = \underline{n}$ pour $x_2 < 0$ et $n = \bar{n} > \underline{n}$ pour $x_2 > 0$, avec $\nabla \phi = 0$, $u_n = (0, U)$ et $\eta = 0$. Nous perturbons légèrement cette interface qui est maintenant représentée par le graphe de la fonction $x_2 = \varepsilon \sin(\xi x_1)$ où ε représente l'intensité

de la perturbation ($\varepsilon \ll 1$) et ξ est sa fréquence spatiale.

Le terme $u_n \times B$ dans (1.30) crée une accumulation de charges le long de l'interface qui est alternativement positive ou négative. Un champ électrique $-\nabla\phi$ parallèle à l'interface avec un signe similaire à l'accumulation est généré d'après (1.30). Alors, par (1.29), une composante non nulle de la vitesse u dans la direction normale à l'interface est créée avec encore une alternance de signe. D'après le signe de u_n , cette composante de la vitesse tend à soit augmenter la modulation de l'interface soit à la diminuer. Le premier cas est un cas stable tandis que le second est instable. La configuration géométrique précise est décrite sur la figure 1.9.

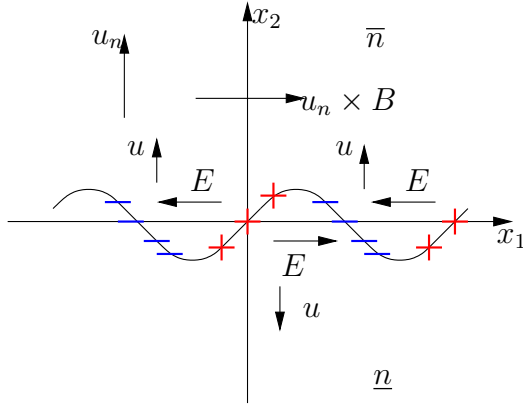


Figure 1.8: Configuration stable

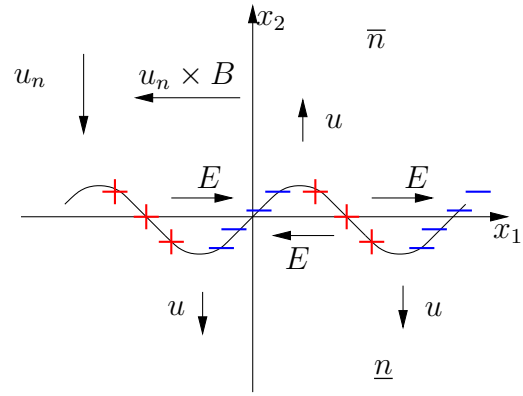


Figure 1.9: Configuration instable

Le modèle striation met donc en jeu une instabilité de dérive de gradient ou encore l'instabilité de dérive en $E \times B$ (voir [Fa, FK]).

Afin de valider théoriquement l'analyse phénoménologique, nous réalisons des analyses de stabilité linéaire pour différent type de profils de densité exponentielle ou discontinus. Les profils de densité exponentielle sont les seuls états stationnaires réguliers non constants permettant, via une analyse de Fourier, de faire des calculs explicites. Ce premier cadre est bien connu, mais est assez irréaliste. Nous étudions donc le cas moins commun des profils discontinus qui nécessitent l'introduction des solutions faibles. Cette étude permet d'établir des constatations plus fines. Elle montre que le modèle striation est bien instable dans certaines configurations du vent de neutres et fournit le taux de croissance des instabilités en fonction de la discontinuité de la densité.

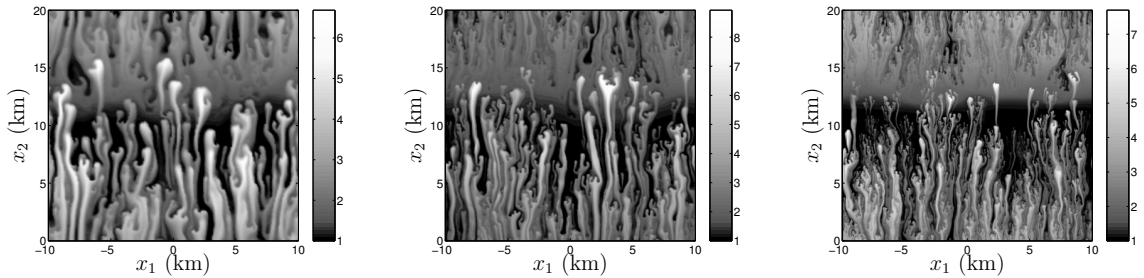
En pratique, l'instabilité sature et se transmet aux échelles plus petites par la non linéarité [Fa, RSS], jusqu'à ce que finalement elle soit effacée par la dissipation. En fait, dans le modèle striation, tous les **mécanismes de dissipation** ont été

supprimés. Plusieurs directions sont possibles pour réintroduire ces effets de dissipation. Le modèle dynamo, où les effets de température finie et de conductivité finie sont retenus, permet théoriquement de retrouver ces mécanismes. Cependant, en pratique, l'intensité de la dissipation est trop petite et il faut considérer d'autres sources de dissipation. Nous choisissons alors d'étudier l'influence possible de la turbulence fluide. En mécanique des fluides, il est bien connu que la turbulence permet d'augmenter la dissipation [1]. L'approche statistique de la turbulence considère des moyennes des équations de Navier-Stokes sur plusieurs réalisations d'une même solution. La suite des équations résultantes est fermée par différents types d'hypothèses phénoménologiques qui sont encore non justifiées mathématiquement sauf dans quelques cas simples. Les modèles obtenus (comme le modèle $K-\epsilon$) mettent en jeu des termes additionnels, de types diffusifs, par rapport aux équations classiques de Navier-Stokes qui décrivent l'augmentation de la diffusion par la turbulence. Nous développons ainsi une analyse similaire et construisons un nouveau modèle, dit modèle striation turbulent, contenant de nouveaux mécanismes de dissipation (nous avons supprimé les effets de pression pour simplifier l'analyse). Ce modèle s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_t n + \nabla \cdot (nu) - \nabla \cdot (D \nabla n) &= 0, \quad u = -\nabla \phi \times B, \\ -\nabla \cdot (n \nu \nabla \phi) &= -\nabla \cdot J_n, \quad J_n = \nu u_n \times B. \end{aligned}$$

où D est un coefficient de diffusion positif. Son analyse de stabilité linéaire montre qu'il possède des régions de stabilité inexistantes auparavant.

Des expériences numériques sont menées. Sur le modèle striation, nous observons que des structures de tailles de plus en plus petites apparaissent quand le nombre de cellules de maillages augmente, ce qui démontre bien le caractère instable du modèle. D'autre part, des simulations similaires pour le modèle striation turbulent démontrent son caractère stable. En effet, les mêmes structures réapparaissent pour différentes taille du maillage (voir FIG. 1.10). En outre, les simulations numériques valident l'approche phénoménologique développée ci-dessus.



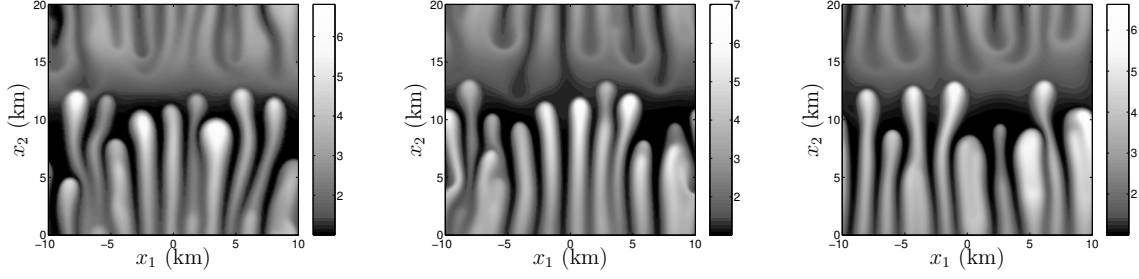


Figure 1.10: Evolution des instabilités pour différents maillages (200×200 , 400×400 et 800×800) sans diffusion (partie haute) et avec diffusion (partie basse)

1.4.3 Analyse des instabilités non linéaires du modèle striation [17]

Nous avons montré par une analyse de stabilité linéaire que le modèle striation (1.29-1.30) est instable pour des profils de densité exponentielle. Bien que cette analyse permette de justifier la croissance de l'instabilité, elle n'indique en rien que toutes les solutions sont instables et qu'elles restent bien non linéairement instables. En général, pour un système d'équations aux dérivées partielles, il est difficile de déduire l'**instabilité non linéaire** à partir de l'instabilité linéaire, car on ne peut pas facilement contrôler le taux de croissance de la partie non linéaire des solutions.

Afin de démontrer ce résultat, nous considérons le système striation (1.29-1.30) sans pression. Les solutions sont supposées périodiques dans la direction x_2 et l'hypothèse d'instabilité (sens du gradient de densité et du vent de neutre opposés) a lieu dans la direction x_1 . Nous montrons tout d'abord l'existence de solutions classiques localement en temps. La preuve résulte d'un théorème de point fixe et d'estimations d'énergie dans des espaces de Sobolev. Nous étendons ensuite la preuve de stabilité linéaire à des profils stationnaires généraux autour de la solution $(n, u) = (\bar{n}(x_1), 0)$ avec $\bar{n}$ régulière, borné inférieurement et $u_n = (U, 0)$. L'hypothèse d'instabilité est désormais moins contraignante. Il suffit en effet qu'il existe un point x_0 tel que $-(U\partial_{x_1}\bar{n})|_{x_0}$ pour que l'instabilité se développe. Nous linéarisons ainsi le système striation en prenant $n = \bar{n} + \eta$ et $u = \nabla\psi \times B$. Les variables η et ψ sont alors solutions de

$$\begin{aligned} \partial_t \eta + \partial_{x_1} \bar{n} \partial_{x_2} \psi &= 0, \\ -\nabla \cdot (\bar{n} \nabla \psi) &= U \partial_{x_2} \eta. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Les coefficients du système linéarisé ne sont alors plus constants et les calculs ne sont ainsi plus explicites. Cependant, le système résultant possède une structure variationnelle permettant la recherche d'ondes planes

$$(\eta, \psi)(x_1, x_2, t) = (\tilde{\eta}(x_1), \tilde{\psi}(x_1)) \exp(ikx_2) \exp(\lambda_k t).$$

Le taux de croissance λ_k est déterminé en résolvant un problème de minimisation sous contrainte qui conduit à

$$\lambda_k = \sup_{\psi \in H^1(\mathbb{R})} \frac{-\int U \partial_{x_1} \bar{n} \psi^2 dx_1}{\int \bar{n} ((\partial_{x_1} \psi)^2 / k^2 + \psi^2) dx_1}.$$

Nous montrons alors que λ_k est borné par

$$\Lambda = \sup_{\psi \in H^1(\mathbb{R}^2)} \frac{-\int \int U \partial_{x_1} \bar{n} w^2 dx_1 dx_2}{\int \int \bar{n} w^2 dx_1 dx_2},$$

qui contrôle le taux de croissance des solutions du système linéarisé par

$$|\eta(t)|_{H^s} + |\nabla \psi(t)|_{H^s} \leq C |\eta(0)|_{H^s} (1 + t^2) e^{\Lambda t}.$$

Un résultat similaire existe pour le système (1.31) avec second membre.

Pour déduire l'instabilité non linéaire à partir de l'instabilité linéaire, nous considérons (n^δ, u^δ) solution du système striation avec la donnée initiale $\bar{n} + \delta \eta_K(0)$, où (η_K, u_K) est une solution bien choisie de (1.31). A cause de la forte non linéarité du système striation, on ne peut pas montrer directement que (n^δ, u^δ) se comporte comme (η_K, u_K) . Nous construisons donc une solution approchée (n^a, u^a) de (n^δ, u^δ) sous la forme d'un développement asymptotique en puissance de δ . L'ordre du développement est choisi pour que le reste $(n^\delta - n^a, u^\delta - u^a)$ soit négligeable. Alors, on montre que (n^a, u^a) est instable en utilisant le résultat précédent.

Le résultat est donc

Théorème 1.4.1. *Soit k un entier plus grand que 3, avec $\bar{n}$ vérifiant*

- $\nabla \bar{n} \in \cap_{k \in \mathbb{N}} H^k$,
- $\exists c > 0, \quad \exists C > 0, \forall x \in \mathbb{R}, c \leq \bar{n}(x) \leq C$
- $\exists x_0 \in \mathbb{R}, U \partial_x \bar{n}(x_0) < 0$.

Alors, l'état stationnaire $(\bar{n}, 0)$ est instable : il existe $\varepsilon_0 > 0$, tel que pour tout $\delta > 0$, il existe une solution (n^δ, u^δ) du système striation telle que $\|n^\delta(0, \cdot) - \bar{n}\|_{H^k} \leq \delta$, mais, pour un certain choix de T^δ , $\|n^\delta(T^\delta, \cdot) - \bar{n}\|_{L^2 \cap L^\infty} + \|u^\delta(T^\delta, \cdot)\|_{L^2 \cap L^\infty} \geq \varepsilon_0$.

1.4.4 Simulation numérique des striations ionosphériques en champ magnétique non uniforme [18]

Le modèle striation classique est dérivé dans le cadre d'un champ magnétique uniforme. Lorsque l'on considère un champ magnétique non uniforme, par exemple un champ magnétique dipolaire comme le champ magnétique terrestre, il convient

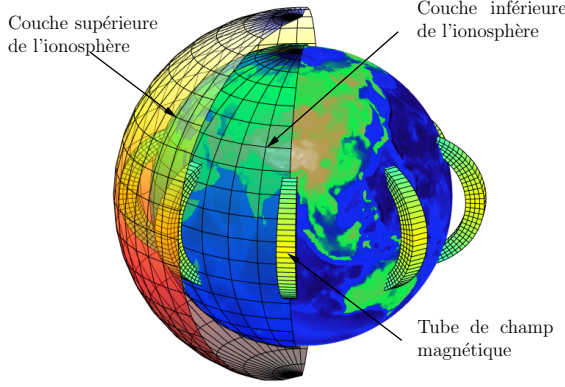


Figure 1.11: Tube de champ magnétique dans l'environnement terrestre

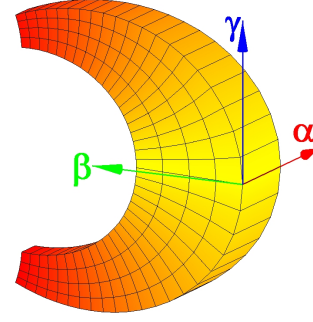


Figure 1.12: Système de coordonnées locales liés à un tube de champ magnétique

d'introduire un système local (α, β, γ) de coordonnées curvilignes rendant compte de la géométrie liée à B (voir figure 1.12). Le modèle striation qui en découle ne peut plus alors être réduit simplement à un système en deux dimensions d'espace. La troisième coordonnée rentre en jeu. Ce nouveau modèle, dit modèle striation non uniforme multicouches, transforme les variables du modèle striation en des quantités intégrées sur des tranches de tubes de champ. Le champ électrique reste la seule quantité indépendante de la troisième coordonnée. Ce modèle s'écrit ainsi dans le système de coordonnées (α, β, γ) :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (nu) = 0, \quad (1.32)$$

$$u_\alpha = r \sin \varphi \frac{\partial \phi}{\partial \beta}, \quad u_\beta = -\frac{1}{r \sin \varphi |B|} \frac{\partial \phi}{\partial \alpha}, \quad u_\gamma = u_{n\gamma} - \frac{\eta |B|}{\nu} \partial_\gamma \log n, \quad (1.33)$$

$$\frac{\partial J_\alpha}{\partial \alpha} + \frac{\partial J_\beta}{\partial \beta} = 0, \quad (1.34)$$

$$J_\alpha = -A_\alpha \frac{\partial \phi}{\partial \alpha} - (U_{n\beta} - 2\eta \Pi_\beta), \quad J_\beta = -A_\beta \frac{\partial \phi}{\partial \beta} + (U_{n\alpha} - 2\eta \Pi_\alpha), \quad (1.35)$$

$$A_\alpha = \int_{\gamma_{min}}^{\gamma_{max}} n\nu \frac{d\gamma}{r^2 \sin^2 \varphi |B|^4}, \quad A_\beta = \int_{\gamma_{min}}^{\gamma_{max}} n\nu \frac{r^2 \sin^2 \varphi d\gamma}{|B|^2}, \quad (1.36)$$

$$U_{n\alpha} = \int_{\gamma_{min}}^{\gamma_{max}} n\nu u_{n\alpha} \frac{r \sin \varphi d\gamma}{|B|^2}, \quad U_{n\beta} = \int_{\gamma_{min}}^{\gamma_{max}} n\nu u_{n\beta} \frac{d\gamma}{r \sin \varphi |B|^3}, \quad (1.37)$$

$$\Pi_\alpha = \int_{\gamma_{min}}^{\gamma_{max}} \frac{\partial \log n}{\partial \alpha} \frac{d\gamma}{|B|^2}, \quad \Pi_\beta = \int_{\gamma_{min}}^{\gamma_{max}} \frac{\partial \log n}{\partial \beta} \frac{d\gamma}{|B|^2}, \quad (1.38)$$

où (r, θ, φ) désigne le système de coordonnées sphériques (on peut montrer que $\alpha = \theta$). Les simulations numériques sont dorénavant tridimensionnelles. D'autre

part, le champ de vitesse dans le modèle striation classique est à divergence nulle. L'adjonction du système de coordonnées curvilignes fait perdre cette propriété. Le traitement de l'équation de transport s'en retrouve donc affecté. Si l'on rajoute au vent de neutre l'effet du gradient de pression, le transport couple les différents plans (ou surfaces) perpendiculaires à B .

En négligeant les composantes le long de B de la vitesse des neutres et du gradient de pression, on peut montrer que le transport s'effectue de manière découplé sur les différents plans perpendiculaires aux lignes de champ de B . Bien que non physique, ce cadre permet de mettre en oeuvre un code adapté à la géométrie particulière du modèle. Le modèle s'écrit ainsi

$$\begin{aligned} \partial_t n + u_\alpha \partial_\alpha n + u_\beta \partial_\beta n &= n S_n, & u_\alpha &= \partial_\beta \phi, & u_\beta &= -\partial_\alpha \phi, \\ -\nabla \cdot (\mathcal{A} \nabla \phi) &= -\nabla \cdot J_n, & \mathcal{A} &= \begin{pmatrix} A_\alpha & 0 \\ 0 & A_\beta \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} S_n &= |B|^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{|B|^2} \right) \partial_\alpha \phi, \\ J_{n\alpha} &= - \int n u_{n\beta} \nu d\gamma / (r \sin \varphi |B|^3), \\ J_{n\beta} &= \int n u_{n\alpha} \nu r \sin \varphi d\gamma / |B|^2. \end{aligned}$$

Les opérateurs ∇ et $\nabla \cdot$ désignent ici les expressions : $\nabla \phi = (\partial_\alpha \phi, \partial_\beta \phi)$ et $\nabla \cdot J = \partial_\alpha J_\alpha + \partial_\beta J_\beta$. L'équation de transport est ainsi résolue sur chaque couche (voir figure

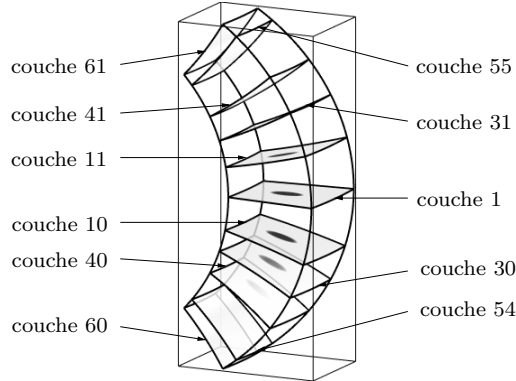


Figure 1.13: Densité initiale de plasma sur un échantillon de couches du modèle.

1.13). Un schéma TVD classique (Ultra Bee) est utilisé avec un splitting directionnel. Le terme nS_n résultant de la divergence non nulle de la vitesse est traité de manière explicite ou implicite suivant son signe. L'équation (1.34) reste, comme dans le

cadre du champ magnétique uniforme, une équation elliptique. Les intégrales sont décomposées sur chacune des couches du modèle, ce qui conduit, pour un modèle a nb couches constituées par les intervalles $[\gamma_i, \gamma_{i+1}]$ $\gamma_1 < \gamma_2 < \dots < \gamma_{nb+1}$, aux expressions suivantes :

$$A_\alpha = \nu \sum_{k=1}^{nb} n_k \int_{\gamma_k}^{\gamma_{k+1}} \frac{d\gamma}{r^2 \sin^2 \varphi |B|^4}, \quad A_\beta = \nu \sum_{k=1}^{nb} n_k \int_{\gamma_k}^{\gamma_{k+1}} \frac{r^2 \sin^2 \varphi d\gamma}{|B|^2},$$

et

$$J_{n\alpha} = -\nu \sum_{k=1}^{nb} u_{n,\beta,k} n_k \int_{\gamma_k}^{\gamma_{k+1}} \frac{d\gamma}{r \sin \varphi |B|^3}, \quad J_{n\alpha} = \nu \sum_{k=1}^{nb} u_{n,\alpha,k} n_k \int_{\gamma_k}^{\gamma_{k+1}} \frac{r \sin \varphi d\gamma}{|B|^2}.$$

Nous résolvons l'équation résultante par TFQMR (Transpose Free QMR method) préconditionnée par une factorisation LU incomplète. Les simulations (voir FIG. 1.14) permettent de retrouver un comportement similaire à des expériences sur des lâchés de Baryum dans l'ionosphère.

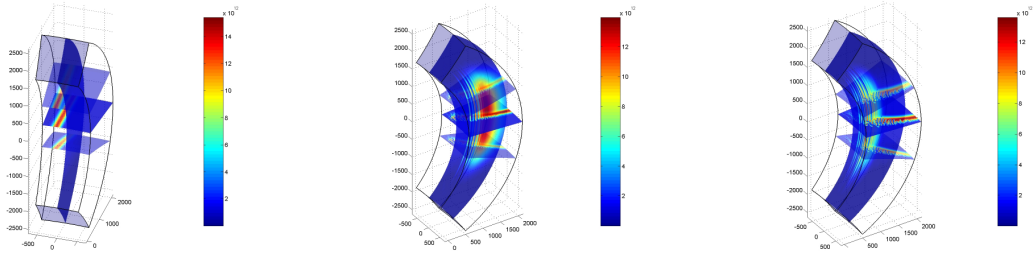


Figure 1.14: Evolution de la densité dans un champ magnétique non uniforme pour des temps $t = 0$, $t = 1250s$ et $t = 2250s$.

Afin de réaliser une simulation complète, il reste maintenant à ajouter la prise en compte de la composante du vent de neutre alignée avec B et des effets de pression. Dans un premier temps, la pression est considérée comme une variable de la densité via une loi adiabatique ou isotherme. Cependant, il faut à terme décrire son évolution par une équation d'énergie qui permette de calculer la pression en fonction de la densité et de la température. Ceci constitue un travail crucial pour comprendre les effets du gradient de pression sur l'évolution des striations ionosphériques.

1.5 Travaux de l'auteur classés par thèmes

1.5.1 Méthodes numériques pour les équations de Schrödinger non linéaires et modélisation

- [1] C. Besse et C.H. Bruneau, *Numerical study of elliptic-hyperbolic Davey-Stewartson system: dromions simulation and blow-up*, M3AS, Vol. 8, No. 8 (1998) pp 1363-1386.

Cet article est paru pendant la durée de ma thèse de doctorat.

- [2] C. Besse, *A relaxation scheme for Nonlinear Schrödinger Equation*, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 42, No. 3, (2004), pp 934-952.
- [3] C. Besse, *Schéma de relaxation pour l'équation de Schrödinger non linéaire et les systèmes de Davey et Stewartson*, C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I, Vol. 326, No. 12, (1998) pp 1427-1432.

La note [3] est une annonce de [2] parue pendant la durée de ma thèse de doctorat.

- [4] C. Besse, B. Bidégaray et S. Descombes, *Order estimates in time of splitting methods for the nonlinear Schrödinger equation*, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 40, No. 1, (2002), pp 26-40.
- [5] C. Besse, N. Mauser, H.-P. Stimming, *Numerical study of the Davey-Stewartson system*, soumis à M2AN Math. Model. Numer. Anal.
- [6] C. Besse et D. Lannes, *A numerical study of the long-wave short-wave resonance for 3D water waves*, European Journal of Mechanic-B/Fluids, Vol. 20, No. 5, (2001), pp 627-650.
- [7] C. Besse et B. Bidégaray, *Numerical study of self-focusing solutions to the Schrödinger-Debye system*, M2AN Math. Model. Numer. Anal., Vol. 35, No. 1, (2001), pp 35-55.
- [8] C. Besse, B. Bidégaray-Fresquet, A. Bourgeade, P. Degond et O. Saut, *A Maxwell-Bloch model with discrete symmetries for wave propagation in nonlinear crystals: an application to KDP*, M2AN Math. Model. Numer. Anal., Vol. 38, No. 2, (2004), pp 321-344.

1.5.2 Conditions aux limites absorbantes pour les équations de Schrödinger linéaire et non linéaire

- [9] X. Antoine et C. Besse, *Unconditionally stable discretization schemes of non-reflecting boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation*, J.

Comp. Phys., Vol. 188, No. 1, (2003), pp 157-175.

- [10] X. Antoine et C. Besse, *Étude microlocale d'une condition transparente pour l'équation de Schrödinger linéaire*, C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I, Vol. 331, No. 5, (2000), pp 359-364.

La note [10] est une annonce de [11]

- [11] X. Antoine et C. Besse, *Construction, structure and asymptotic approximations of a microdifferential transparent boundary condition for the linear Schrödinger equation*, J. Math. Pures Appl. (9), Vol. 80, No. 7, (2001), pp 701-738.
- [12] X. Antoine et C. Besse, *Artificial Boundary Conditions for Schrödinger-type Equations and Their Numerical Approximation*, publié dans le livre : 'Scientific Computing and Applications: Advances in Computation: Theory and Practice', Science Press (Beijing) (2004).
- [13] X. Antoine, C. Besse et V. Mouysset, *Numerical schemes for the simulation of the two-dimensional Schrödinger equation using non-reflecting boundary conditions*, Math. of Comp., Vol. 73, No. 248, (2004), pp 1779-1799.
- [14] X. Antoine, C. Besse, S. Descombes, *Mathematical and numerical analysis of nonlinear artificial boundary conditions for the one-dimensional nonlinear Schrödinger equation*, soumis à SIAM J. Numer. Anal.

1.5.3 Modélisation d'instabilités du plasma ionosphérique terrestre, étude mathématique et numérique

- [15] C. Besse, J. Claudel, P. Degond, F. Deluzet, G. Gallice, C. Tessieras, *A model hierarchy for ionospheric plasma modeling*, M3AS, Vol 14, No. 3, (2004), pp 393-415.
- [16] C. Besse, J. Claudel, P. Degond, F. Deluzet, G. Gallice, C. Tessieras, *Instability of the ionospheric plasma: modeling and analysis*, soumis à Siam J. Appl. Math.
- [17] C. Besse, P. Degond, H.-J. Hwang, R. Poncet, *Nonlinear instability of the two-dimensional striation model about smooth steady states*, soumis à Comm. Partial Differential Equations.
- [18] C. Besse, J. Claudel, P. Degond, F. Deluzet, G. Gallice, C. Tessieras, *Numerical simulation of the ionospheric dynamo model in a non-uniform magnetic field*, en cours de soumission.

- [19] C. Besse, J. Claudel, P. Degond, F. Deluzet, G. Gallice, C. Tessieras, *Ionospheric plasmas: model derivation, stability analysis and numerical simulations*, dans 'Numerical method for hyperbolic and kinetic problems', Th. Goudon and E. Sonnendrücker (eds), de Gruyter (à paraître).

L'article [19] reprend [15], [16] et [18].

Bibliographie

- [AR] D. Alterman, J. Rauch, *The linear diffractive pulse equation*, *Methods Appl. Anal.*, Vol. 7, No. 2 (2000), pp. 263–274.
- [ADK] G. Akrivis, V. Dougalis, O. Karakashian, *Solving the systems of equations arising in the discretization of some nonlinear p.d.e.'s by implicit Runge-Kutta methods*, *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.*, Vol. 31, No. 2, (1997), pp. 251–287.
- [Arn] A. Arnold, *Mathematical concepts of open quantum boundary conditions*, *Transp. Theory Stat. Phys.*, Vol. 30, (2001) pp. 561–584.
- [ArE] A. Arnold, M. Ehrhardt, *Discrete transparent boundary conditions for wide angle parabolic equations in underwater acoustics*, *J. Comp. Phys.*, Vol. 145, (1998) pp. 611–638.
- [BM] W. G. Baker, D. F. Martyn, *Electric currents in the ionosphere, Part I to III*, *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **A246** (1953) pp. 295–320.
- [BJM1] W. Bao, S. Jin, P. A. Markowich, *On Time-splitting spectral approximations for the Schrödinger equation in the semiclassical regime*, *J. Comp. Phys.* Vol. 175, No.2 (2002), pp. 487–524.
- [BJM2] W. Bao, S. Jin, P. A. Markowich, *Numerical study of time-splitting spectral discretizations of nonlinear Schrodinger equations in the semi-classical regimes*, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 25, No. 1., (2003), pp. 27–64.
- [BP] V.A. Baskakov, A.V. Popov, *Implementation of transparent boundaries for numerical solution of the Schrödinger equation*, *Wave Motion*, Vol.14 (1991), pp. 123–128.
- [BAP] N. Ben Abdallah, O. Pinaud, *A mathematical model for the transient evolution of a resonant tunneling diode*, *C. R. Math. Acad. Sci., Paris*, Vol. 334, (2002), pp. 283–288.
- [Bi1] B. Bidégaray, *On the Cauchy problem for systems occurring in nonlinear optics*, *Adv. Differential Equations*, Vol. 3, (1998), pp. 473–496.

Bibliographie

- [Bi2] B. Bidégaray, *The Cauchy problem for Schrödinger-Debye equations*, *M3AS*, Vol. 10, (2000), pp. 307–315.
- [BAR] B. Bidégaray, A. Bourgeade, D. Reignier, *Introducing physical relaxation terms in Bloch equations*, *J. Comput. Phys.*, Vol. 170, No.2 (2001), pp. 603–613.
- [Bo] J. M. Bony, *Calcul symbolique et propagation des singularités pour les équations aux dérivées partielles non linéaires*, *Ann. Sci. Ec. Norm. Sup (4ème série)*, Vol. 14, (1981) pp. 209–246.
- [BdM] L. Boutet de Monvel, *Propagation des singularités d'équations analogues à l'équation de Schrödinger*, *Fourier Integral Operators and Partial Differential Equations, Lectures Notes in Math.*, Vol. 459, Springer-Verlag, Berlin, (1975), pp. 1–14.
- [Ch] S. Chandrasekhar, *Hydrodynamic and hydromagnetic stability*, Dover, (1981).
- [CL] T. Colin, D. Lannes *Long-wave short-wave resonance for nonlinear geometric optics*, *Duke Math. J.*, Vol. 107, No. 2 (2001), pp. 351–419.
- [DFP] M. Delfour, M. Fortin, and G. Payre., *Finite-difference solutions of a nonlinear Schrödinger equation*, *J. Comput. Phys.*, Vol. 44, No.2, (1981), 277–288.
- [Di] L. Di Menza, *Transparent and absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation in a bounded domain*, *Numer. Funct. Anal. Optim.*, Vol. 18, No. 7-8 (1997), pp. 759–775.
- [Do] P. Donnat, *Quelques contributions mathématiques en optique non linéaire*, *PhD thesis*, École polytechnique, (1994).
- [DSS] A. Durán, J. M. Sanz-Serna, *The numerical integration of relative equilibrium solutions. The nonlinear Schrödinger equation*, *IMA J. Numer. Anal.*, Vol. 20, No. 2 (2000), pp. 235–261.
- [EM1] B. Engquist, A. Majda, *Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves*, *Math. Comp.* Vol. 31 (1977), pp. 629–651.
- [EM2] B. Engquist, A. Majda, *Radiation boundary conditions for acoustic and elastic wave calculations*, *Comm. Pure Appl. Math.*, Vol. 32 (1979), pp. 313–357.
- [Fa] D. T. Farley, *Theory of equatorial eletrojet plasma waves, new developments and current status*, *J. Atm. Terr. Phys.* Vol. 47 (1985) pp. 729–744.
- [FK] B. G. Fejer, M. C. Kelley, *Ionospheric irregularities, Reviews of geophysics and space physics*, Vol. 18 (1980) pp. 401–454.

- [FV] T. Fevens and H. Jiang, *Absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation*, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 21, No. 1 (1999), pp. 255–282.
- [DJ] T. Ha Duong, P. Joly, *A generalized image principle for the wave equation with absorbing boundary condition and applications to fourth order schemes*, *Numer. Methods Partial Differential Equations*, Vol. 10, No. 4 (1994), pp. 411–434.
- [GS] J. M. Ghidaglia, J. C. Saut, *On the initial value problem for the Davey-Stewartson systems*, *Nonlinearity*, Vol. 3, (1990) 475–506.
- [GK] M. Grote, J. Keller, *Exact nonreflecting boundary conditions for the time dependent wave equation*, *SIAM J. Appl. Math.*, Vol. 55, (1995) pp. 280–297.
- [HR] L. Halpern, J. Rauch, *Absorbing boundary conditions for diffusion equations*, *Numer. Math.*, Vol. 71, (1995) pp. 185–224.
- [HH] H. Han, Z. Huang, *Exact artificial boundary conditions for schrödinger equation in $\mathbb{R}^2$* , *Comm. Math. Sci.*, Vol. 2, No. 1 (2004), pp. 79–94.
- [La] R. Lascar, *Propagation des singularités des solutions d’équations pseudo-différentielles quasi-homogènes*, *Ann. Inst. Fourier*, Vol. 27, No. 2 (1977), pp. 79–123.
- [LV] D. Lanser, J. G. Verwer, *Analysis of operator splitting for advection-diffusion-reaction problems from air pollution modelling*, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 111, No. 1-2 (1999), pp. 201–216.
- [Ma] B. Mayfield, *Non Local Boundary Conditions for the Schrödinger Equation*, Ph. Thesis, University of Rhodes Island, Providence, RI, (1989).
- [1] B. Mohammadi, O. Pironneau, *Analysis of the K-Epsilon Turbulence Model*, Wiley, (1994).
- [Ni] L. Nirenberg, *Pseudodifferential operators and some applications*, *CBMS Regional Conf. Ser. in Math. AMS*, Vol. 17 (1973), Lectures on Linear Partial Differential Equations, pp. 19–58.
- [Pa] J.S. Papadakis, *Impedance formulation of the bottom boundary condition for the parabolic equation model in underwater acoustics*, *NORDA Parabolic Equation Workshop*, NORDA Tech. Note 143, (1982).
- [RSS] C. Ronchi, P. L. Similon, R. N. Sudan, *A nonlocal linear theory of the gradient drift instability in the equatorial electrojet*, *J. Geophys. Res.* vol. 94 (1989) pp. 1317–1326.

Bibliographie

- [Sc] A. Schädle, *Non-reflecting boundary conditions for the two-dimensional Schrödinger equation*, *Wave Motion*, Vol. 35 (2002), pp. 181–188.
- [SD] F. Schmidt and P. Deuffhard, *Discrete transparent boundary conditions for the numerical solution of Fresnel's equation*, *Comput. Math. Appl.*, Vol.29, No. 9 (1995), pp. 53–76.
- [SY] F. Schmidt and D. Yevick, *Discrete transparent boundary conditions for Schrödinger-type equations*, *J. Comput. Phys.*, Vol. 134 (1997), pp. 96–107.
- [SS] C. Sulem, P.-L. Sulem, *The Nonlinear Schrödinger Equation: Self-Focusing and Wave Collapse*, Springer, New York (1999).
- [Sze] J. Szeftel, *Calcul pseudodifférentiel et paradifférentiel pour l'étude de conditions aux limites absorbantes et de propriétés qualitatives d'équations aux dérivées partielles non linéaires*, Thèse Université Paris 13, (2004).
- [WW] P.W. White, J.A.C Weideman, *Numerical simulation of solitons and dromions in the Davey-Stewartson system*, *Math. Comput. Simul.* Vol 37, No. 4-5(1994), pp. 469–479.
- [Za] A.I. Zayed, *Handbook of Function and Generalized Function Transformation*, CRC Press, (1996).