



Analyse asymptotique, spectrale et numérique pour quelques problèmes elliptiques issus de la physique ou de la mécanique

Virginie Bonnaillie-Noël

► To cite this version:

Virginie Bonnaillie-Noël. Analyse asymptotique, spectrale et numérique pour quelques problèmes elliptiques issus de la physique ou de la mécanique. Analyse numérique [math.NA]. Université Rennes 1, 2011. <tel-00650033>

HAL Id: tel-00650033

<https://theses.hal.science/tel-00650033v1>

Submitted on 9 Dec 2011

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.



HAL Authorization



HDR / UNIVERSITÉ DE RENNES 1

sous le sceau de l'Université européenne de Bretagne

pour obtenir

L'HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

Mention : Mathématiques

présentée par

Virginie Bonnaillie - Noël

Préparée à l'Unité Mixte de Recherche 6625

Institut de recherche mathématique de Rennes

**Analyse asymptotique,
spectrale et numérique
pour quelques problèmes
elliptiques issus de
la physique ou de la
mécanique**

Habilitation soutenue le 8 juin 2011

Composition du jury :

Habib Ammari

Directeur de recherche - DMA, ENS Paris / *rapporteur*

Pedro Freitas

Professeur - Université de Lisbonne / *rapporteur*

Patrick Joly

Directeur de recherche - POems, INRIA Rocquencourt / *rapporteur*

François Alouges

Professeur - CMPA, École polytechnique / *examineur*

Monique Dauge

Directrice de recherche - IRMAR, Université Rennes 1 / *examineur*

Maria J. Esteban

Directrice de recherche - CEREMADE, Université Paris - Dauphine / *examineur*

Bernard Helffer

Professeur - Dpt. de mathématiques d'Orsay, Université Paris-Sud 11 / *examineur*

Yvon Maday

Professeur - Laboratoire Jacques-Louis Lions, UPMC / *examineur*

Remerciements

Ce document fait la synthèse de quelques années de recherches qui ont évolué, mûri, changé de direction, émergé au grès des rencontres. Je remercie toutes les personnes qui ont contribué d'une manière ou d'une autre à ce que ce manuscrit prenne forme.

Je voudrais tout d'abord remercier mes directeurs de thèse, François Alouges et Bernard Helffer, pour leurs conseils, l'intérêt porté à mes travaux, leur soutien et leur disponibilité. Ils m'ont donné l'occasion d'aborder un problème avec une double approche, numérique et théorique et cela m'a convaincue de poursuivre dans cette voie. Leur présence aujourd'hui me fait particulièrement plaisir. Je tiens à remercier Habib Ammari, Pedro Freitas et Patrick Joly d'avoir accepté de rapporter sur ce travail. Les remarques et discussions ont permis d'améliorer la présentation de ce manuscrit. Monique Dauge s'est intéressée à mes travaux dès le début de ma thèse. Je la remercie d'avoir accepté de représenter Rennes dans ce jury. Je suis très honorée que Maria Esteban et Yvon Maday aient accepté de faire partie de mon jury malgré leur emploi du temps très chargé, je les en remercie vivement.

Un merci très sincère à Bernard, Francis, Frédéric, Grégory, Marc, Pauline qui ont relu partiellement ou intégralement les premières versions de ce manuscrit.

Je tiens à remercier toutes les personnes avec lesquelles j'ai eu l'occasion de travailler et en particulier mes co-auteurs : F. Alouges, D. Brancherie, M. Dambrine, M. Dauge, A. Faraj, S. Fournais, B. Helffer, F. Hérau, T. Hoffmann-Ostenhof, D. Martin, F. Nier, Y. Patel, N. Popoff, N. Raymond, S. Tordeux, G. Vial.

Je souhaite faire une mention spéciale à MACADAM et acolytes. Merci pour le temps passé ensemble, aussi bien à rédiger le projet, les comptes-rendus, à faire les bilans financiers, mais surtout, à faire des maths (c'est quand même cela le but) et tout cela, dans une ambiance mêlant sérieux, décontraction et bonne humeur. Bien au-delà de simples collègues, Grégory et Marc sont maintenant de véritables amis et je vous remercie sincèrement de votre soutien dans les bons moments et les moins bons. Au moment d'écrire ces derniers lignes, je viens d'apprendre le départ de Céline et Greg pour Lyon. Félicitations à vous deux mais vous allez créer un grand vide, notamment dans le couloir de Ker-Lann ! Qui vais-je interrompre pour partager un thé, un potin, poser des questions de maths ou mac, ... ?

Lors de mon arrivée à Rennes, j'ai reçu un accueil chaleureux de l'université de Rennes 1 et de l'ENS Cachan Bretagne. Je remercie les personnes que j'y ai rencontrées, notamment Michel et Arnaud ! Merci à Francis, Grégory et Monique avec qui j'ai immédiatement collaboré. Une grande partie de mes travaux n'aurait pas existé sans la librairie d'éléments finis MÉLINA. Mille mercis à Daniel Martin pour avoir fait naître et grandir MÉLINA.

Merci aux personnes des équipes d'analyse numérique et EDP de l'IRMAR : Arnaud, Aziz, Benjamin, Daniel, Éric, Erwan, Fabrice, Florian, François, Gabriel, Grégory, Marc, Martin, Michel, Mohammed, Monique, Olivier, Philippe, Raymond, Rozenn, Yannick, Yvon ; Christophe, Francis, Frédéric, Nicolas,

Nicoletta, Taoufic, San, Zied. Merci aux autres ker-lannais : Benoît, Bruno et aux thésards (et anciens thésards) du plateau pour la bonne humeur qu'ils diffusent : Nicolas, Sandrine, Clément, Jimmy, Ludovic, Fanny, Agnès, Julia, Charles-Édouard, Guillaume, Shanshan, Thibault, ... Merci pour les soirées au laser-game, les décorations de Noël, les poissons, les grenouilles,...

Le personnel administratif, technique et informatique a un rôle fondamental dans notre métier et nous aide au quotidien. Merci à Chantal Halet, Hélène Rousseaux, Claude Boschet, Vathana Lardoux, Marie-Annick Paulmier, Marie-Émilie Hamel, Karina Guerrier, Martine Raffestin, Pierrick Denuel, Solène Macé, Patrick Pérez, Christine Bardet, Cécile Bruneau, Philippe Bardet, Philippe Buneaux, Pascal Jolivet, Sophie Stephan, ... Merci aussi au personnel des bibliothèques de Beaulieu et Ker-Lann, en particulier Christophe Stephan, Rose-Marie Tardif, Maryse Collin, Marie-Annick Guillemer, Dominique Hervé.

Ces dernières années, j'ai passé *un peu de* temps au comité national. Je remercie les personnes que j'ai cotoyées à cette occasion (en particulier les membres de la section 1, Jean-Marc Gambaudo, Guy Métivier, Françoise Balestie, Frédéric Coquel, Patrick Dehornoy, Laurence Labbé, ...) car j'y ai beaucoup appris, même si cela ne donnera ni théorème, ni article.

J'ai passé de très bons moments, sérieux ou pas, avec les collègues de l'option B. Merci aux plus anciens, Florence, Franck, Pascal, Pauline, Stéphane, Thierry ! J'attends le cru 2011...

Merci à Véro, Fred, Sandrine, Nico, Élise, Vanessa et Ludo même si tu n'es plus là pour partager ce moment.

Je voudrais remercier ma famille, en particulier mes parents qui sont toujours disponibles pour nous aider. Merci de m'avoir soutenue, encouragée et donné les moyens de faire ce que je voulais. Merci à mes frères, sœurs, beaux-frères et belles-sœurs dont chaque appel commence par "où es-tu ?" et se termine par "où vas-tu ?" Merci à mes neveux, nièces et filleuls pour notre complicité : merci aux tout-petits (Chloé et Loïc), aux petits (Evan, Louis, Victor et Madeline), aux grands (Grégoire, Baptiste, Antoine, Hugo, Margaux) et aux très grands (Charles, Cyril et Simon).

Et enfin : Merci Tony !! de tout, de rien, d'être là, même si c'est loin parfois...

À Antoine, Evan, Hugo, Madeline

À Tony

Table des matières

Introduction	5
1 Analyse mathématique de la supraconductivité	7
1.1 Modélisation	7
1.2 Opérateurs modèles	9
1.2.1 Opérateur de de Gennes	9
1.2.2 Plan et demi-plan	10
1.2.3 Secteurs angulaires	11
1.3 Opérateur de Schrödinger dans un domaine à coins	14
1.4 Localisation de la supraconductivité	17
1.5 Opérateur de Schrödinger en dimension 3	18
1.5.1 Demi-espace	18
1.5.2 Dièdre	22
1.6 Perspectives	24
2 Modèle de transport quantique dans les semi-conducteurs	25
2.1 Modélisation	25
2.2 Résultats théoriques	27
2.3 Implémentation et validation du modèle asymptotique	29
3 Analyse multi-échelle et numérique de problèmes elliptiques perturbés	33
3.1 Introduction	33
3.2 Développement asymptotique pour l'équation de Laplace	34
3.2.1 Cas d'une inclusion	34
3.2.2 Cas de deux inclusions	36
3.3 Extension à l'élasticité linéaire	40
3.4 Simulations numériques	41
3.4.1 Méthode de superposition	41
3.4.2 Calcul des profils	42
3.4.3 Simulations numériques	44
3.5 Perspectives	47
4 Partitions minimales et nodales	49
4.1 Survol de quelques résultats connus	49
4.1.1 Partitions minimales	49
4.1.2 Partitions nodales	50
4.1.3 Lien entre partitions minimales et nodales	50
4.2 3-partitions symétriques	52
4.2.1 Topologie des 3-partitions minimales symétriques	53

TABLE DES MATIÈRES

4.2.2	Résultats numériques	53
4.3	Opérateur de Aharonov-Bohm	55
4.3.1	Définitions	55
4.3.2	Isospectralité	55
4.3.3	L'approche par revêtement	57
4.3.4	Simulations numériques	57
4.4	Mécanisme de déformation pour les 3-partitions	62
4.5	k -partitions pour $k \geq 5$	64
4.5.1	5-partitions	64
4.5.2	Asymptotique lorsque $k \rightarrow +\infty$	65
4.6	Perspectives	65
4.6.1	Partitions minimales pour d'autres critères	65
4.6.2	Caractérisation de $\mathfrak{L}_k(\Omega)$ à l'aide du Hamiltonien de Aharonov-Bohm	66
4.6.3	3-partition minimale du carré et du disque	66

Introduction

Mes travaux de recherche sont liés à l'analyse asymptotique, l'approximation numérique et la théorie spectrale de problèmes elliptiques. J'allie les résultats théoriques et les simulations numériques pour préciser le comportement des solutions : la théorie permettant de proposer des méthodes numériques plus performantes et de prévoir certaines difficultés numériques, les simulations illustrant parfois des comportements plus fins que ceux démontrés jusque-là ou suggérant de nouvelles conjectures.

Ce document se découpe en quatre chapitres, chacun correspondant à un thème de recherche.

Le premier thème de recherche que je vais aborder concerne l'analyse mathématique de la supraconductivité qui était le sujet de ma thèse. Cette thématique a fait l'objet de collaborations avec F. Alouges, M. Dauge, S. Fournais, B. Helffer, D. Martin, N. Popoff, N. Raymond et G. Vial. Notre objectif est de comprendre l'influence de la géométrie du matériau sur l'apparition de la supraconductivité. La première étape consiste à étudier le spectre de l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique et paramètre semi-classique dans les domaines à coins. Nous avons établi un développement asymptotique des modes propres et montré que les vecteurs propres avaient une structure double échelle, ce qui rend les simulations numériques très délicates. Nous avons proposé une approche basée sur la méthode d'éléments finis nodaux de haut degré et mis en évidence l'effet tunnel pour des domaines symétriques. Ces résultats ont ensuite permis d'étudier les minimiseurs de la fonctionnelle de Ginzburg-Landau et d'établir la localisation du paramètre d'ordre qui rend compte de la densité des électrons supraconducteurs, lorsqu'on abaisse progressivement le champ magnétique appliqué. Très peu d'études avaient été réalisées pour les domaines à coins. Nous en avons maintenant une compréhension assez précise en dimension 2. Récemment, nous avons commencé l'étude en dimension 3 dans le cadre de la thèse de N. Popoff, avec M. Dauge.

La deuxième partie de ce document présente un modèle simplifié pour le transport quantique dans des diodes à effet tunnel résonant. Elle résulte de collaborations avec A. Faraj, F. Nier et Y. Patel. Ce dernier a réalisé une analyse asymptotique fine de systèmes de Schrödinger-Poisson stationnaires, non linéaires uni-dimensionnels dans un régime hors-équilibre. Nous avons proposé une adaptation numérique de cette analyse afin de déterminer rapidement des diagrammes *courant-tension* et de bifurcation et montré la pertinence de ce modèle réduit en le comparant à un modèle 1D de Schrödinger-Poisson avec traitement numérique complet des états résonnants.

Dans le cadre du projet ANR jeunes chercheurs n° JCJC06-139561 MACADAM, je me suis intéressée à l'analyse multi-échelle et numérique de problèmes elliptiques perturbés, en collaboration avec D. Brancherie, M. Dambrine, S. Tordeux, F. Hérau et G. Vial. Ce projet consiste à étudier l'influence de petites perturbations géométriques sur la solution de problèmes elliptiques. Les cas d'une inclusion isolée ou de plusieurs bien séparées ont été largement étudiés. Nous considérons plus précisément le cas où la distance entre deux inclusions tend vers zéro mais reste grande par rapport à leur taille caractéristique. Nous donnons un développement asymptotique multi-échelle complet de la solution de l'équation de La-

Introduction

place dans la situation de deux inclusions. Nous présentons également quelques simulations numériques basées sur une méthode de superposition multi-échelle de la solution non perturbée et d'un profil (solution normalisée de l'équation de Laplace dans le domaine extérieur obtenu par blow-up de la perturbation). Nous étendons ces techniques aux équations de l'élasticité linéaire afin de prédire le comportement à rupture de certains matériaux présentant des micro-défauts. Nous avons également proposé des méthodes pour calculer effectivement les profils intervenant dans le développement asymptotique. Ceci a soulevé des questions mathématiques liées à la perte de coercivité provenant de conditions de Ventcel dégénérées.

Le dernier chapitre propose quelques résultats sur les partitions minimales, en collaboration avec B. Helffer, T. Hoffmann-Ostenhof, C. Léna et G. Vial. Nous souhaitons comprendre le lien entre la k -partition minimale, pour laquelle la plus grande première valeur propre du Laplacien-Dirichlet sur les k sous-domaines est minimale parmi les k -partitions, et les ensembles nodaux des vecteurs propres du Laplacien avec condition de Dirichlet. Nous nous sommes focalisés sur le cas $k = 3$ pour lequel on ne connaît pas, en général, de partition optimale même pour des géométries très simples telles que le carré ou le disque. En se restreignant aux configurations symétriques, nous utilisons la méthode d'éléments finis pour exhiber des candidats aux 3-partitions minimales symétriques du disque, du carré ou d'autres géométries. Cette étude numérique nous a conduits à des problèmes d'isospectralité que nous avons résolus en utilisant le Hamiltonien de Aharonov-Bohm. L'introduction de cet opérateur pour résoudre une question théorique a ouvert une nouvelle piste numérique qui consiste à calculer les modes propres par une méthode d'éléments finis sur un revêtement à deux feuillets et d'étudier le comportement des lignes nodales en fonction du point singulier. Cela nous a permis de dégager de nouveaux candidats aux partitions minimales.

Chapitre 1

Analyse mathématique de la supraconductivité

J'ai abordé cette thématique durant ma thèse sous la direction de François Alouges et Bernard Helffer. J'ai ensuite travaillé sur ce sujet en collaboration avec Monique Dauge, Soeren Fournais, Daniel Martin, Nicolas Popoff, Nicolas Raymond et Grégory Vial. Ce thème fait l'objet des articles [AB03, AB06, Bo03b, Bo04, Bo05a, Bo05b, BD06, BDMV07, BF07, Bo11].

1.1 Modélisation

La supraconductivité est la propriété que possèdent certains matériaux de laisser passer le courant sans dissipation d'énergie lorsqu'ils sont maintenus en dessous d'une température critique T_C . Cette propriété disparaît lorsque le matériau est soumis à un champ magnétique extérieur trop intense. En revanche, lorsque le champ externe n'est pas trop élevé, en plus d'être supraconducteur, le matériau repousse le champ extérieur. Ce phénomène est appelé *effet Meissner*. On distingue deux sortes de supraconducteurs. Les supraconducteurs de type I ne possèdent qu'un champ critique et lorsque l'intensité du champ magnétique externe augmente, ils passent directement de l'état supraconducteur avec effet Meissner à l'état normal pour lequel la supraconductivité est détruite. Les supraconducteurs dits de type II possèdent deux champs critiques H_{C_1} et H_{C_3} . Lorsque le champ appliqué est inférieur à H_{C_1} , en plus d'être supraconducteur, le matériau repousse le champ extérieur. Lorsqu'on augmente progressivement l'intensité du champ appliqué, $H_{C_1} \leq H \leq H_{C_3}$, le matériau est supraconducteur mais le champ extérieur pénètre ponctuellement à travers des tubes, appelés vortex, de plus en plus denses. Au delà de H_{C_3} , le matériau a perdu toute propriété supraconductrice.

Plusieurs physiciens ont proposé des modèles pour décrire ce phénomène : London en 1935, Ginzburg et Landau en 1952, Bardeen, Cooper et Schrieffer en 1957. Nous nous limiterons à la modélisation de Ginzburg-Landau qui décrit de façon phénoménologique la supraconductivité. Cette modélisation, confortée par la théorie macroscopique de Gorkov, s'appuie sur la théorie générale de transitions de phase du second ordre développée par Landau en 1937 (cf. [Ti96]). Elle suppose l'existence d'un paramètre d'ordre ψ tendant vers 0 à la transition de phase et d'une écriture de l'énergie libre selon les puissances de ψ . Nous considérons un échantillon Ω supraconducteur, supposé sans trou et soumis à un champ magnétique $\mathcal{H} = H \operatorname{rot} \mathcal{A}_0$. Alors, après renormalisation, l'énergie libre de ce matériau est donnée par la fonctionnelle de Ginzburg-Landau dont le premier terme représente l'énergie associée aux électrons supraconducteurs et le deuxième, l'énergie magnétique :

$$\mathcal{E}_{\kappa, H}[\psi, \mathcal{A}] = \int_{\Omega} \left\{ |(\nabla - i\kappa H \mathcal{A})\psi|^2 - \kappa^2 |\psi|^2 + \frac{\kappa^2}{2} |\psi|^4 \right\} dx + \kappa^2 H^2 \int_{\mathbb{R}^d} |\operatorname{rot}(\mathcal{A} - \mathcal{A}_0)|^2 dx, \quad (1.1.1)$$

1.1 Modélisation

où Ω est un ouvert borné simplement connexe de $\mathbb{R}^d$ ($d = 2$, ou 3) à bord Lipschitzien, $\psi \in W^{1,2}(\Omega; \mathbb{C})$, $\mathcal{A} \in \dot{H}_{\mathcal{A}_0, \text{div}}^1 = \mathcal{A}_0 + \dot{H}_{\text{div}}^1$ avec $\dot{H}_{\text{div}}^1 = \{\mathcal{A} \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d) \mid \text{div } \mathcal{A} = 0\}$, $\dot{H}^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$ l'espace de Sobolev homogène et

$$\begin{cases} \mathcal{A}_0(x_1, x_2) &= \frac{1}{2}(-x_2, x_1) & \text{si } d = 2, \\ \mathcal{A}_0(x_1, x_2, x_3) &= (-\frac{x_2}{2} \cos \gamma, \frac{x_1}{2} \cos \gamma, \sin \gamma (\sin \theta x_2 - \cos \theta x_1)) & \text{si } d = 3, \end{cases}$$

de sorte que

$$\mathcal{B}_0 := \text{rot } \mathcal{A}_0$$

soit un vecteur unitaire. Physiquement, $\mathcal{B}_0$ représente l'orientation du champ magnétique appliqué $\mathcal{H} = H\mathcal{B}_0$. On remarque que

$$\begin{cases} \mathcal{B}_0(x_1, x_2) &= (0, 0, 1) & \text{si } d = 2, \\ \mathcal{B}_0(x_1, x_2) &= (\sin \gamma \sin \theta, \sin \gamma \cos \theta, \cos \gamma) & \text{si } d = 3. \end{cases}$$

Nous nous intéressons au comportement des supraconducteurs de type II pour lesquels le paramètre κ est grand. La fonction ψ définie sur Ω à valeurs complexes est appelée paramètre d'ordre, son module $|\psi|^2$ rend compte de la densité des paires d'électrons supraconducteurs et sa phase, de la circulation de courant. Ainsi, $|\psi| \simeq 0$ correspond à l'état normal quand le matériau n'est pas supraconducteur et $|\psi| \simeq 1$ à la phase supraconductrice. Le champ de vecteurs $\mathcal{A}$, défini sur $\mathbb{R}^d$ à valeurs dans $\mathbb{R}^d$ est le potentiel magnétique induit. Son champ magnétique associé est $\mathcal{B} = \text{rot } \mathcal{A}$. On identifie ce champ à un scalaire en dimension $d = 2$. Les états physiquement stables sont les minimiseurs $(\psi, \mathcal{A}) \in W^{1,2}(\Omega) \times \dot{H}_{\mathcal{A}_0, \text{div}}^1$ de la fonctionnelle $\mathcal{E}_{\kappa, H}$ de Ginzburg-Landau qui vérifient les équations d'Euler-Lagrange :

$$\begin{cases} -(\nabla - i\kappa H \mathcal{A})^2 \psi = \kappa^2(1 - |\psi|^2)\psi & \text{sur } \Omega, \\ \text{rot}^2 \mathcal{A} = \left\{ -\frac{i}{2\kappa H} (\bar{\psi} \nabla \psi - \psi \nabla \bar{\psi}) - |\psi|^2 \mathcal{A} \right\} 1_\Omega(x) & \text{sur } \mathbb{R}^d, \\ (\nabla - i\kappa H \mathcal{A})\psi \cdot \nu = 0 & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (1.1.2)$$

D'après un résultat de Giorgi et Phillips [GP02], on sait que lorsque l'on fixe κ et que H est assez grand, le seul minimiseur (à changement de jauge près) est la solution dite normale $(\psi, \mathcal{A}) = (0, \mathcal{A}_0)$. Afin de comprendre l'apparition de la supraconductivité, on va donc linéariser au premier ordre au voisinage du point $(\psi, \mathcal{A}) = (0, \mathcal{A}_0)$ (cf. [dPFS00, HP03]). On est alors amené à étudier la réalisation de Neumann $P_{h, \mathcal{A}}$ de l'opérateur de Schrödinger $-(h\nabla - i\mathcal{A})^2$ lorsque le paramètre h tend vers 0. Ce paramètre provient d'un changement de variable $h = 1/(\kappa H)$ dans la fonctionnelle $\mathcal{E}_{\kappa, H}$ définie en (1.1.1) où H est l'intensité du champ appliqué.

L'un de nos objectifs est de comprendre l'influence des coins lors de l'apparition de la supraconductivité. Nous avons commencé par supposer que Ω était un domaine borné simplement connexe à bord lipschitzien de $\mathbb{R}^2$ et que le champ est normal à la section Ω . La réduction d'un problème de $\mathbb{R}^3$ à un échantillon de $\mathbb{R}^2$ dans l'écriture de la fonctionnelle (1.1.1) peut avoir deux interprétations physiques :

- Le domaine Ω est la section d'un cylindre infiniment long dans $\mathbb{R}^3$;
- Le domaine Ω est le domaine « limite » d'un film de fine épaisseur dans $\mathbb{R}^3$.

L'étude des minimiseurs de la fonctionnelle de Ginzburg-Landau présentée en Section 1.4 requiert des informations sur l'opérateur linéarisé associé, c'est-à-dire l'opérateur de Schrödinger $P_{h, \mathcal{A}}$ sur les domaines de $\mathbb{R}^2$ à coins. Dans cette optique, la Section 1.3 précise les résultats que nous avons démontrés concernant le développement asymptotique des modes propres de l'opérateur de Schrödinger $P_{h, \mathcal{A}}$ sur un polygone curviligne du plan lorsque $h \rightarrow 0$. Pour construire ces développements asymptotiques, nous avons analysé le spectre d'opérateurs modèles en Section 1.2 : la famille d'opérateurs de de Gennes

$-\partial_t^2 + (t - \zeta)^2$ sur $\mathbb{R}_+$ en Section 1.2.1, l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique constant $-(\nabla - i\mathcal{A}_0)^2$ sur le plan et le demi-plan en Section 1.2.2 et sur les secteurs angulaires à la Section 1.2.3. Récemment, nous avons commencé l'étude de domaines à coins en dimension 3 dans le cadre de la thèse de Nicolas Popoff [Po]. La Section 1.5 présente les premiers résultats.

Pour terminer cette partie, mentionnons que l'opérateur de Schrödinger $P_{h,\mathcal{A}}$ est invariant par changement de jauge au sens de la proposition suivante :

Proposition 1.1.1. *Supposons Ω simplement connexe. Soit $\phi \in H^2(\Omega)$, alors u est un vecteur propre associé à la valeur propre μ pour l'opérateur $P_{h,\mathcal{A}}$ si et seulement si $u_\phi := e^{i\phi/h}u$ est un vecteur propre associé à la valeur propre μ pour l'opérateur $P_{\mathcal{A}+\nabla\phi}$.*

En particulier, les valeurs propres de l'opérateur de Schrödinger sont les mêmes pour tout potentiel $\tilde{\mathcal{A}}$ tel que $\text{rot } \tilde{\mathcal{A}} = \text{rot } \mathcal{A}$. Ceci permet de choisir une jauge adaptée lors des simulations numériques. De plus, le spectre de l'opérateur de $P_{h,\mathcal{A}}$ ne dépend que du champ magnétique associé $\mathcal{B} = \text{rot } \mathcal{A}$. Remarquons que la fonctionnelle de Ginzburg-Landau est également invariante par changement de jauge au sens où si $[\psi, \mathcal{A}]$ est un minimiseur, alors $[e^{i\phi}\psi, \mathcal{A} + \nabla\phi]$ l'est aussi.

Tout au long de ce chapitre, nous noterons $\text{sp}(A)$ le spectre d'un opérateur A et

$$D_t = -i\partial_t.$$

1.2 Opérateurs modèles

1.2.1 Opérateur de de Gennes

Commençons par rappeler certains résultats sur une famille d'opérateurs uni-dimensionnels dont les caractéristiques apparaissent très souvent en supraconductivité. Pour tout $\zeta \in \mathbb{R}$, on considère l'opérateur à résolvante compacte

$$H(\zeta) = D_t^2 + (t - \zeta)^2 \quad \text{sur} \quad (0, +\infty),$$

défini sur

$$\mathcal{D} = \{u \in H^2(\mathbb{R}_+) \mid t^2 u \in L^2(\mathbb{R}_+) \text{ et } u'(0) = 0\}.$$

On note $\mu_{k,H}(\zeta)$ la k^{e} plus petite valeur propre de $H(\zeta)$, comptée avec multiplicité. Les propriétés spectrales de cette famille d'opérateurs sont bien connues (cf. [DH93]) :

Proposition 1.2.1. *Il existe $\zeta_0 > 0$ tel que $\mu_{1,H}$ soit strictement décroissante de $(-\infty, \zeta_0)$ sur $(+\infty, \Theta_0)$ et strictement croissante de $[\zeta_0, +\infty)$ sur $[\Theta_0, 1)$. De plus, si on note Φ_{ζ_0} le vecteur propre positif normalisé associé à $\mu_{1,H}(\zeta_0)$, on a*

$$\int_0^\infty (|\Phi'_{\zeta_0}(t)|^2 + (t - \zeta_0)^2 |\Phi_{\zeta_0}(t)|^2) dt = \Theta_0, \quad \int_0^\infty (t - \zeta_0) |\Phi_{\zeta_0}(t)|^2 dt = 0,$$

$$|\Phi_{\zeta_0}(0)|^2 = \frac{\mu''_{1,H}(\zeta_0)}{2\zeta_0}, \quad \Theta_0 = \zeta_0^2 = \min_{\zeta \in \mathbb{R}} \mu_{1,H}(\zeta).$$

En utilisant les fonctions de Weber ou la méthode de représentation intégrale, De Gennes–Saint-James [dGSJ63] et Chapman [Ch94] ont donné une valeur approchée de Θ_0 par 0.59010 (ou 0.59). Mentionnons également que M. Persson a proposé une valeur de Θ_0 avec autant de décimales qu'on le souhaite à l'aide de MATHEMATICA. Toutefois, ces travaux ne précisent ni l'ordre de l'approximation de Θ_0 , ni d'estimation de $\Phi_{\zeta_0}(0)$. L'objet de l'article [Bo11] est de donner des estimations très précises

1.2 Opérateurs modèles

de Θ_0 et $\Phi_{\zeta_0}(0)$ en contrôlant les erreurs commises. Pour cela, on utilise simplement une méthode de différences finies sur un segment $[0, L]$ en imposant une condition de Dirichlet en L . On se sert de ce calcul numérique pour construire explicitement un quasi-mode et calculer son quotient de Rayleigh. Les estimations d'erreur se font à l'aide du théorème spectral [He88, Proposition 4.1.1, p. 30] :

Proposition 1.2.2. *Soient A un opérateur auto-adjoint sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$, de domaine $\mathcal{D}(A)$, $I \subset \mathbb{R}$ un intervalle compact, $\Psi_1, \dots, \Psi_N \in \mathcal{H}$ des fonctions linéairement indépendantes de $\mathcal{D}(A)$ et $\mu_1, \dots, \mu_N \in I$ tels que $A\Psi_j = \mu_j\Psi_j + r_j$ avec $\|r_j\|_{\mathcal{H}} \leq \varepsilon$. On considère un réel $a > 0$ tel que $\text{sp}(A) \cap (I + \mathcal{B}(0, 2a) \setminus I) = \emptyset$. On note E le sous-espace engendré par $\Psi_1, \dots, \Psi_N$ et F le sous-espace propre de $\text{sp}(A) \cap I$. On a alors*

$$d(E; F) \leq \frac{\varepsilon\sqrt{N}}{a\sqrt{\lambda_S^{\min}}},$$

où $\lambda_S^{\min}$ est la plus petite valeur propre de $S = (\langle \Psi_j, \Psi_k \rangle_{\mathcal{H}})$ et d la distance non-symétrique définie par $d(E; F) = \|\Pi_E - \Pi_F\Pi_E\|_{\mathcal{H}}$, avec Π_E, Π_F les projections orthogonales sur E et F .

Nous montrons ainsi le résultat suivant :

Théorème 1.2.3.

$$|\Theta_0 - 0.590106125| \leq 10^{-9} \quad \text{et} \quad |\Phi_{\zeta_0}(0) - 0.87304| \leq 5 \times 10^{-5}.$$

La Figure 1.1 donne le graphe des premières valeurs propres $\mu_{k,H}(\zeta)$ calculées par une méthode d'éléments finis et la librairie MÉLINA [Ma07].

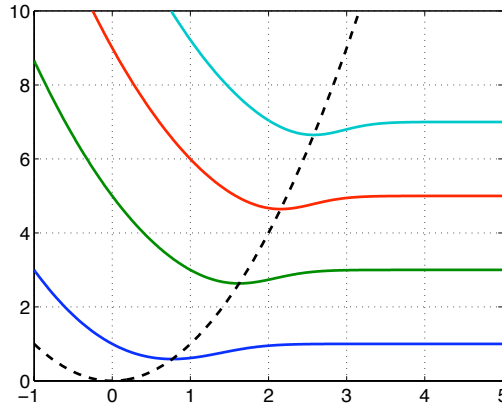


FIGURE 1.1 – $\zeta \mapsto \mu_{k,H}(\zeta)$ pour $k = 1, \dots, 4$ et $\zeta \mapsto \zeta^2$ en pointillés.

1.2.2 Plan et demi-plan

On note $X = (X_1, X_2)$ les coordonnées cartésiennes de $\mathbb{R}^2$. On considère respectivement $Q^{\overline{2\pi}}$ et Q^π la réalisation de Neumann de l'opérateur $-(\nabla - iA_0)^2$ sur $\mathbb{R}^2$ et $\mathbb{R}_+^2 := \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}$, définis sur les domaines

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(Q^{\overline{2\pi}}) &= \left\{ \Psi \in L^2(\mathbb{R}^2), \quad (\nabla - iA_0)^k \Psi \in L^2(\mathbb{R}^2), \quad k = 1, 2 \right\}, \\ \mathcal{D}(Q^\pi) &= \left\{ \Psi \in L^2(\mathbb{R}_+^2), \quad (\nabla - iA_0)^k \Psi \in L^2(\mathbb{R}_+^2), \quad k = 1, 2, \quad \nu \cdot (\nabla - iA_0)\Psi|_{X_1=0} = 0 \right\}. \end{aligned}$$

Le spectre de ces opérateurs, noté $\text{sp}(Q^{\overline{2\pi}})$ et $\text{sp}(Q^\pi)$ est bien connu (cf. [DH93] pour l'étude du demi-plan) :

Proposition 1.2.4.

- $\text{sp}(Q^{2\pi}) = \{2n + 1, n \in \mathbb{N}\}$ et les valeurs propres sont de multiplicité infinie.
- $\inf \text{sp}(Q^\pi) = \Theta_0$ et est un élément du spectre essentiel.

Expliquons formellement comment retrouver ces résultats. Par l'invariance de jauge donnée en Proposition 1.1.1, on considère le potentiel $\hat{\mathcal{A}}_0 = (0, X_1)$ qui vérifie $\text{rot } \mathcal{A}_0 = \text{rot } \hat{\mathcal{A}}_0$ et il suffit alors d'étudier le spectre de l'opérateur de Schrödinger :

$$-\partial_{X_1}^2 - (\partial_{X_2} - iX_1)^2 \quad \text{sur} \quad \mathbb{R}^2 \text{ ou } \mathbb{R}_+^2.$$

Après une transformation de Fourier en la variable X_2 (cf. [RS78]), on se ramène à étudier la famille d'opérateurs :

$$-\partial_{X_1}^2 + (\zeta - X_1)^2 \quad \text{avec} \quad X_1 \in \mathbb{R} \text{ ou } \mathbb{R}_+.$$

Par un changement de variables, on se ramène donc, dans le cas du plan, à l'étude de l'oscillateur hamonique $-\partial_t^2 + t^2$ sur $\mathbb{R}$ dont les valeurs propres, appelées niveaux de Landau, sont les entiers impairs. L'étude de l'opérateur de Schrödinger sur le demi-plan se ramène à celle de l'opérateur de de Gennes $H(\zeta) = -\partial_t^2 + (t - \zeta)^2$ sur $\mathbb{R}_+$ que l'on a mentionné en Section 1.2.1.

1.2.3 Secteurs angulaires

On note $X = (X_1, X_2)$ les coordonnées cartésiennes de $\mathbb{R}^2$, (ρ, θ) les coordonnées polaires, G^α l'intérieur du secteur angulaire de $\mathbb{R}^2$ d'angle α :

$$G^\alpha = \left\{ X \in \mathbb{R}^2, \quad \theta \in \left(-\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2} \right) \right\}. \quad (1.2.1)$$

Lorsque $\alpha = \pi$, on retrouve le demi-plan. On note Q^α la réalisation de Neumann de l'opérateur de Schrödinger $-(\nabla - i\mathcal{A}_0)^2$ sur le secteur G^α . La forme sesquilinéaire q^α associée à l'opérateur Q^α est définie sur l'espace variationnel $\mathcal{V}(q^\alpha)$ comme suit :

$$\mathcal{V}(q^\alpha) = \left\{ \Psi \in L^2(G^\alpha), \quad (\nabla - i\mathcal{A}_0)\Psi \in L^2(G^\alpha) \right\}, \quad (1.2.2)$$

$$q^\alpha(\Psi, \Phi) = \int_{G^\alpha} (\nabla - i\mathcal{A}_0)\Psi(X) \cdot \overline{(\nabla - i\mathcal{A}_0)\Phi(X)} dX, \quad \Psi, \Phi \in \mathcal{V}(q^\alpha). \quad (1.2.3)$$

Sur $\mathcal{V}(q^\alpha)$, on définit la norme :

$$\|\Psi\|_{\mathcal{V}(q^\alpha)}^2 = \|\Psi\|_{L^2(G^\alpha)}^2 + \|(\nabla - i\mathcal{A}_0)\Psi\|_{L^2(G^\alpha)}^2.$$

L'opérateur Q^α s'écrit

$$Q^\alpha = \left(D_{X_1} + \frac{X_2}{2} \right)^2 + \left(D_{X_2} - \frac{X_1}{2} \right)^2 = -\Delta + i(X_1 \partial_{X_2} - X_2 \partial_{X_1}) + \frac{1}{4}|X|^2. \quad (1.2.4)$$

Il est défini sur le domaine

$$\mathcal{D}(Q^\alpha) = \left\{ \Psi \in \mathcal{V}(q^\alpha), \quad (\nabla - i\mathcal{A}_0)^2 \Psi \in L^2(G^\alpha), \quad \nu \cdot (\nabla - i\mathcal{A}_0)\Psi|_{\partial G^\alpha} = 0 \right\},$$

où ν désigne la normale unitaire extérieure au bord de G^α . On note $\mu_k(\alpha)$ le k^{e} plus petit élément du spectre de Q^α , donné par le principe du max-min :

$$\mu_k(\alpha) = \max_{\Psi_1, \dots, \Psi_{k-1}} \min \left\{ \frac{q^\alpha(\Psi, \Psi)}{\langle \Psi, \Psi \rangle}, \quad \Psi \in \mathcal{V}(q^\alpha), \quad \Psi \perp [\Psi_1, \dots, \Psi_{k-1}] \right\}. \quad (1.2.5)$$

1.2 Opérateurs modèles

Ici $\langle \cdot, \cdot \rangle$ désigne le produit scalaire hermitien de $L^2(G^\alpha)$.

Très peu d'études concernaient les domaines à coins. Seul le cas du quart de plan avait été étudié par Jadallah [Ja01] et Pan [Pa02] avec des techniques spécifiques qui ne pouvaient s'appliquer à un secteur G^α d'angle quelconque. Dans [Bo05a], j'ai proposé une étude systématique pour tout angle. Notons que le changement de jauge $u_1(\rho, \theta) = \exp\left(i\frac{\rho^2}{2}\theta\right) u(\rho, \theta)$, suivi du changement de variables $(t, \eta) = \left(\alpha\frac{\rho^2}{2}, \frac{\theta}{\alpha}\right)$ ramènent l'étude de Q^α à celle de la forme quadratique

$$q_\alpha(u) = \int_{\Omega^0} \left(2\alpha t |(\partial_t - i\eta)u|^2 + \frac{1}{2\alpha t} |\partial_\eta u|^2 \right) dt d\eta,$$

où $\Omega^0 = \mathbb{R}_+ \times \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ est un domaine indépendant de α . On voit alors facilement que les fonctions $\alpha \mapsto \alpha\mu_1(\alpha)$ et $\alpha \mapsto \mu_1(\alpha)/\alpha$ sont respectivement croissante et décroissante. On peut par ailleurs utiliser la forme quadratique q_α pour construire un développement asymptotique de $\mu_k(\alpha)$. Le théorème suivant donne quelques résultats que j'ai obtenus concernant le spectre de Q^α .

Théorème 1.2.5.

1. Le bas du spectre essentiel de Q^α vaut $\Theta_0 = \mu_1(\pi)$.
2. Pour tout $\alpha \in (0, \pi)$,

$$\frac{\Theta_0}{\pi} \alpha < \mu_1(\alpha) \leq \frac{\alpha}{\sqrt{3}}. \quad (1.2.6)$$

3. Pour tout $\alpha \in (0, \frac{\pi}{2}]$, $\mu_1(\alpha) < \Theta_0$ et $\mu_1(\alpha)$ est une valeur propre.
4. Soit $\alpha \in (0, 2\pi)$ et K_α le plus grand entier tel que $\mu_{K_\alpha}(\alpha) < \Theta_0$. Pour tout $k \leq K_\alpha$, on note Ψ_k^α un vecteur propre normalisé associé à $\mu_k(\alpha)$. Alors Ψ_k^α vérifie l'estimation de décroissance exponentielle suivante :

$$\forall \varepsilon > 0, \exists C_{\varepsilon, \alpha}, \quad \left\| e^{(\sqrt{\Theta_0 - \mu_k(\alpha)} - \varepsilon)|x|} \Psi_k^\alpha \right\|_{\mathcal{V}(q^\alpha)} \leq C_{\varepsilon, \alpha}. \quad (1.2.7)$$

5. Pour tout entier n , il existe une suite de réels $(m_j)_{j \leq n}$ que l'on peut déterminer de façon récursive (cf. [Bo05a, Proposition 5.1]) telle que

$$\mu_1(\alpha) = \frac{\alpha}{\sqrt{3}} + \sum_{j=1}^n m_j \alpha^{2j+1} + \mathcal{O}_n(\alpha^{2n+3}) \quad \text{quand} \quad \alpha \rightarrow 0.$$

6. Pour tout entier $k \geq 1$,

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\mu_k(\alpha)}{\alpha} = \frac{2k-1}{\sqrt{3}}. \quad (1.2.8)$$

Dans [BDMV07], nous utilisons la librairie d'éléments finis MÉLINA [Ma07] pour calculer le spectre de Q^α . Pour calculer les modes propres de Q^α , nous tronquons les secteurs angulaires G^α et imposons une condition de Dirichlet sur les bords artificiels. Les valeurs propres ainsi calculées donnent des majorations de $\mu_k(\alpha)$. La Figure 1.2 représente les modules du premier vecteur propre pour trois angles différents et illustre ainsi la localisation exponentielle des vecteurs propres au sommet, donnée par la relation (1.2.7). On remarque que lorsque l'angle est petit, le module du vecteur propre est essentiellement radial puis qu'il s'étale le long des bords lorsque l'angle augmente. La décroissance est plus rapide vers l'intérieur que sur les bords. La Figure 1.3 présente les phases du premier vecteur propre de la réalisation de Neumann de $-(h\nabla - i\mathcal{A}_0)^2$, $-(h\nabla - i\tilde{\mathcal{A}}_0)^2$ et $-(h\nabla - i\hat{\mathcal{A}}_0)^2$ avec

$$\mathcal{A}_0(X) = \frac{1}{2}(-X_2, X_1), \quad \tilde{\mathcal{A}}_0(X) = (-X_2, 0) = \mathcal{A}_0(X) - \nabla \frac{X_1 X_2}{2}, \quad \hat{\mathcal{A}}_0(X) = (0, X_1) = \mathcal{A}_0(X) + \nabla \frac{X_1 X_2}{2}.$$

Ces trois opérateurs ont le même champ magnétique constant et en utilisant la Proposition 1.1.1, on voit alors que le vecteur propre diffère d'un facteur de phase.

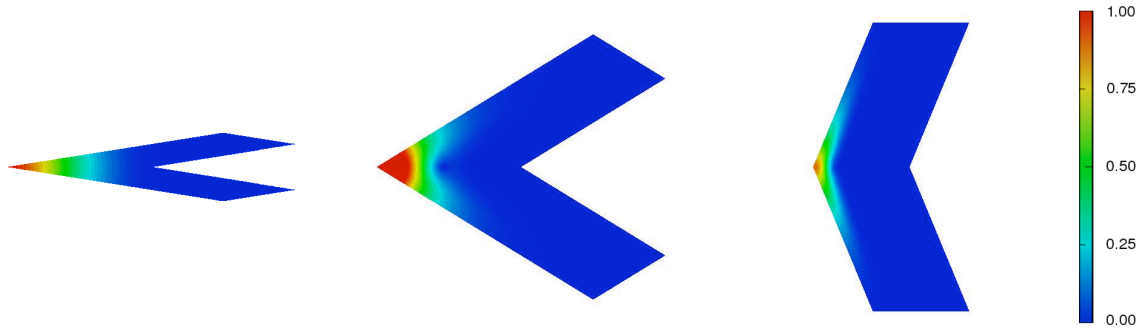


FIGURE 1.2 – Module du premier vecteur propre pour $\alpha = 0.1\pi, 0.35\pi, 0.75\pi$.

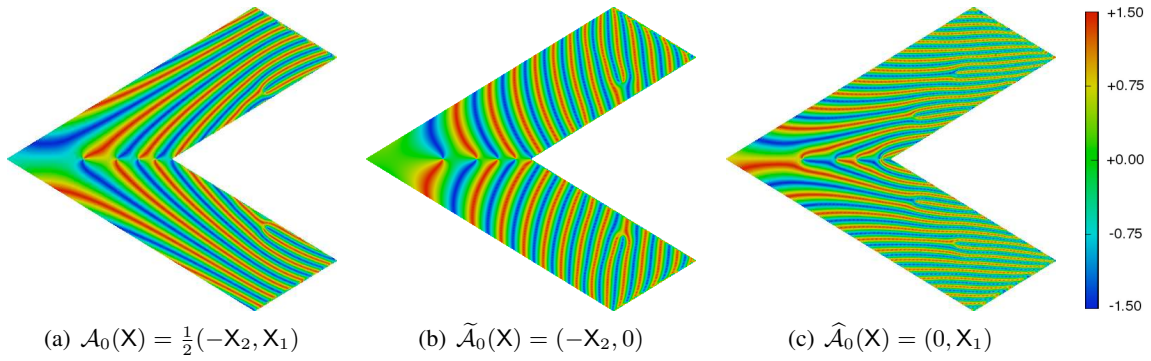


FIGURE 1.3 – Phase du premier vecteur propre pour un champ constant.

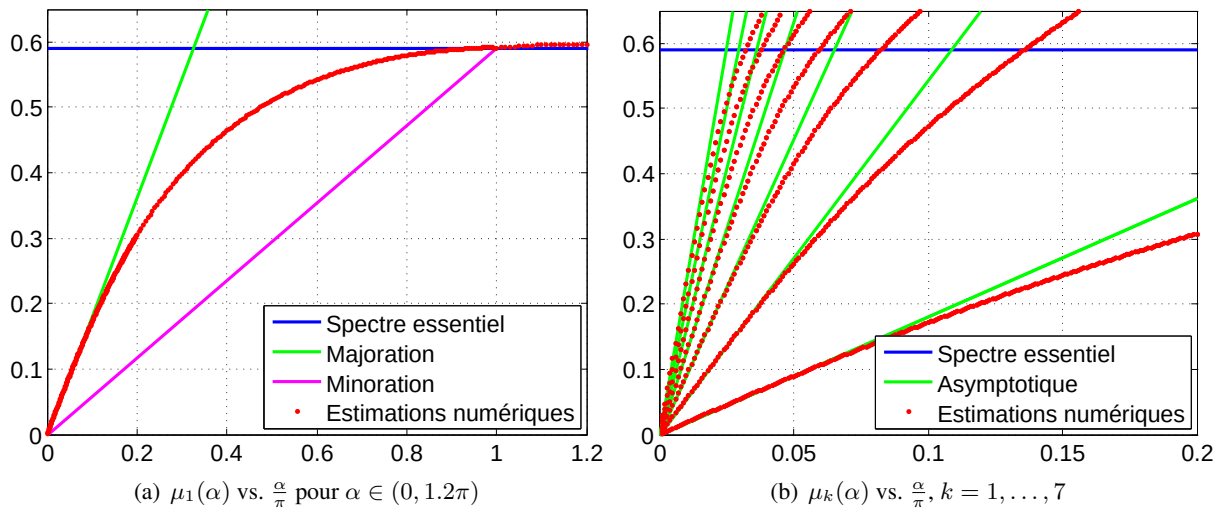


FIGURE 1.4 – Valeurs propres de Q^α .

1.3 Opérateur de Schrödinger dans un domaine à coins

La Figure 1.4(a) représente les valeurs propres calculées pour $\mu_1(\alpha)$ ainsi que les encadrements (1.2.6) (voir aussi [AB06] pour les premières simulations). Elle nous conduit à la conjecture suivante :

Conjecture 1.2.6. *La fonction $\alpha \mapsto \mu_1(\alpha)$ est strictement croissante de $(0, \pi]$ sur $(0, \Theta_0]$ et égale à Θ_0 sur $[\pi, 2\pi]$.*

La Figure 1.4(b) donne les premières valeurs propres calculées pour des angles petits et illustre les asymptotiques (1.2.8) de $\mu_k(\alpha)$. Nous référons à [BDMV07] pour plus de détails sur le calcul numérique de ces asymptotiques.

1.3 Opérateur de Schrödinger dans un domaine à coins

Soient Ω un domaine borné de $\mathbb{R}^2$ et $\mathcal{A}$ un potentiel magnétique régulier de champ associé $\mathcal{B} = \text{rot } \mathcal{A}$. On suppose $\mathcal{B} > 0$. On s'intéresse au comportement des modes propres de la réalisation de Neumann $P_{h,\mathcal{A}}$ sur Ω de l'opérateur de Schrödinger $-(h\nabla - i\mathcal{A})^2$ lorsque $h \rightarrow 0$. Beaucoup d'articles ont été consacrés à l'analyse des premiers modes propres lorsque Ω est un domaine régulier. On peut citer les travaux de Bernoff-Sternberg [BS98], Lu-Pan [LP99, LP00], Helffer-Morame [HM96, HM01] : ils montrent que l'état fondamental est localisé près des points du bord où la courbure est maximale, et donnent un développement asymptotique à deux termes de l'énergie associée. Fournais et Helffer [FH05, FH06b, FH06a, FH09, FH10] ont établi l'asymptotique complète en $h^{1/8}$ des premiers modes propres pour des domaines réguliers dont le bord n'a qu'un point de courbure maximale. Bien que les domaines non réguliers soient souvent mentionnés dans les articles de physique [BDFM99, FDM98, SP99], très peu d'articles en mathématique traitaient de ce sujet : mentionnons les travaux de Jadallah [Ja01] et Pan [Pa02] qui étudient des cas particuliers comme le carré et le quart de plan et [Ja10] pour une approche numérique.

Nous nous sommes intéressés à déterminer le comportement des modes propres de $P_{h,\mathcal{A}}$ sur des polygones curvilignes. Nous avons mené cette étude à la fois théoriquement [Bo03b, Bo05a, Bo05b, BD06] et numériquement [AB03, Bo04, AB06, BDMV07]. Nous utilisons les informations recueillies sur le plan, le demi-plan et les secteurs angulaires pour préciser la localisation des premiers vecteurs propres et le comportement des premières valeurs propres de l'opérateur $P_{h,\mathcal{A}}$ lorsque h tend vers 0.

Énonçons les résultats obtenus pour l'opérateur de Schrödinger avec champ constant $P_{h,\mathcal{A}_0}$ sur un polygone Ω borné du plan. Nous faisons référence à [BD06] pour l'opérateur à champ variable $P_{h,\mathcal{A}}$ sur les polygones curvilignes. Nous allons utiliser les modes propres de $Q^\alpha = -(\nabla - i\mathcal{A}_0)^2$ sur les secteurs angulaires G^α pour construire des quasi-modes de $P_{h,\mathcal{A}_0}$ sur Ω et ainsi déterminer l'asymptotique des modes propres.

Notation 1.3.1. *On note :*

- $(\mu_{h,n}, u_{h,n})$ le n^{e} mode propre de $P_{h,\mathcal{A}_0}$,
- Σ l'ensemble des sommets s de Ω ,
- α_s l'angle au sommet $s \in \Sigma$ dans Ω ,
- $K_\Omega = \sum_{s \in \Sigma} K_{\alpha_s}$ où K_α est le plus grand entier tel que $\mu_{K_\alpha}(\alpha) < \Theta_0$,
- λ_n la n^{e} valeur propre répétée avec multiplicité de $\bigoplus_{s \in \Sigma} Q^{\alpha_s}$,
- Pour $n \leq K_\Omega$, $\Sigma_n = \{s \in \Sigma, \lambda_n \text{ est une valeur propre pour } Q^{\alpha_s}\}$,
- $r(\lambda_n) = \min_{s \in \Sigma_n} d(s, \Sigma \setminus \{s\})$,
- Pour tout k , $1 \leq k \leq K_{\alpha_s}$, on définit la fonction

$$\psi_{h,s,k}(x) = \chi_s(x) \frac{1}{\sqrt{h}} \exp\left(\frac{i}{2h} x \wedge s\right) \Psi_k^{\alpha_s}\left(\frac{\mathcal{R}_s(x-s)}{\sqrt{h}}\right) \quad \text{sur } \Omega, \quad (1.3.1)$$

où $\Psi_k^{\alpha_s}$ est le k^{e} vecteur propre de Q^{α_s} , $\mathcal{R}_s$ est la rotation qui envoie localement le secteur angulaire qui coïncide avec Ω au voisinage de s sur le secteur G^{α_s} et χ_s une fonction de troncature régulière, nulle en dehors de la boule $B(s, d(s, \Sigma \setminus \{s\}))$.

Remarque 1.3.2. La Conjecture 1.2.6 suggère que l'opérateur Q^α a au moins une valeur propre strictement inférieure à Θ_0 dès que $\alpha < \pi$. On aurait alors $K_\Omega \geq 1$ dès que Ω a un sommet dont l'angle associé est aigu.

Théorème 1.3.3. Avec les Notations 1.3.1, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe C_ε tel que

$$|\mu_{h,n} - h\lambda_n| \leq C_\varepsilon \exp\left(-\frac{1}{\sqrt{h}}\left(r(\lambda_n)\sqrt{\Theta_0 - \lambda_n} - \varepsilon\right)\right), \quad \forall n \leq K_\Omega.$$

Comme il peut y avoir répétition dans les valeurs λ_k , il se peut que les valeurs propres $\mu_{h,n}$ se regroupent en clusters. Pour étudier la localisation des vecteurs propres, il faut donc tenir compte de ce regroupement comme le souligne le théorème suivant dont la démonstration repose en partie sur la Proposition 1.2.2.

Théorème 1.3.4. On note

- $\{\Lambda_1 < \dots < \Lambda_M\}$ l'ensemble des valeurs propres distinctes de $\{\lambda_1, \dots, \lambda_{K_\Omega}\}$,
- $F_{h,m}$ le m^{e} cluster de sous-espaces propres de P_{h,A_0} :

$$F_{h,m} = \text{Vect}\{u_{h,n} \text{ pour tout } n \text{ tel que } \lambda_n = \Lambda_m\}, \quad \text{pour } m \leq M,$$

- $E_{h,m}$ le cluster de quasi-modes correspondant :

$$E_{h,m} = \text{Vect}\{\psi_{h,s,k} \text{ pour tout } s \in \Sigma, k \geq 1 \text{ tel que } \mu_k(\alpha_s) = \Lambda_m\}.$$

Alors, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe C_ε tel que

$$d(E_{h,m}; F_{h,m}) \leq C_\varepsilon \exp\left(-\frac{(r(\Lambda_m) - \delta)\sqrt{\Theta_0 - \Lambda_m} - \varepsilon}{\sqrt{h}}\right), \quad \forall m \leq M,$$

où $d(E; F) = \|\Pi_E - \Pi_F \Pi_E\|$ avec Π_E la projection orthogonale sur E .

Ce théorème montre donc que toute fonction propre de P_{h,A_0} pour la valeur propre $\mu_{h,n}$ est exponentiellement proche d'une combinaison linéaire des quasi-modes associés à l'énergie λ_n pour les opérateurs modèles sur les secteurs angulaires.

Intéressons-nous maintenant au calcul numérique des modes propres de P_{h,A_0} . Les quasi-modes (1.3.1) possèdent une structure double échelle, constituée d'une couche limite aux coins à l'échelle $\sqrt{h}$ et d'un terme oscillant à l'échelle h . Les oscillations hautes fréquences rendent les calculs numériques très délicats : une approximation raisonnable pour des petites valeurs de h requiert un raffinement extrême du maillage si nous utilisons une approximation de bas degré. Durant ma thèse (cf. [Bo03a, Bo04, AB06]), j'ai effectué des premiers calculs des modes propres de P_{h,A_0} en utilisant une méthode d'éléments finis et une approximation $\mathbb{P}_1$ ou $\mathbb{P}_2$. J'ai également développé des estimateurs d'erreurs *a posteriori* afin d'associer une méthode bas degré et un raffinement de maillages adapté. Nous avons ensuite proposé dans [BDMV07] une approche différente basée sur une méthode d'éléments finis nodaux de haut degré (jusqu'à 24), utilisant la librairie d'éléments finis MÉLINA [Ma07]. Cette dernière méthode s'est révélée plus performante.

Prenons l'exemple du carré. D'après le Théorème 1.3.3, nous avons

$$\text{Pour } 1 \leq n \leq 4, \quad \frac{\mu_{h,n}}{h} \rightarrow \mu_1\left(\frac{\pi}{2}\right) \quad \text{quand } h \rightarrow 0.$$

À la Figure 1.5, nous représentons le graphe de $\mu_{h,n}/h$ en fonction de $1/h$ à nombre de degrés de liberté fixé et pour des éléments $\mathbb{Q}_1$, $\mathbb{Q}_5$ et $\mathbb{Q}_{20}$. On voit alors que l'approche *p*-version est bien plus adaptée que la *h*-version. Lorsque le degré d'approximation n'est pas suffisant, on capte un niveau de

1.3 Opérateur de Schrödinger dans un domaine à coins

Landau beaucoup moins oscillant mais d'énergie plus élevée. Les courbes en pointillé représentent le tube exponentiel $h^{-1} \mapsto 0.5099 \pm 0.6 \exp(-0.5665h^{-1/2})$ qui exprime la localisation de $\mu_{h,n}/h$ donnée par le Théorème 1.3.3. Les symétries du carré engendrent des interactions entre les sommets ce qui se manifestent par l'effet tunnel que l'on voit par l'entrelacement des valeurs propres à la Figure 1.5. C'est la première fois que l'on met ainsi en évidence numériquement ce phénomène d'effet tunnel.

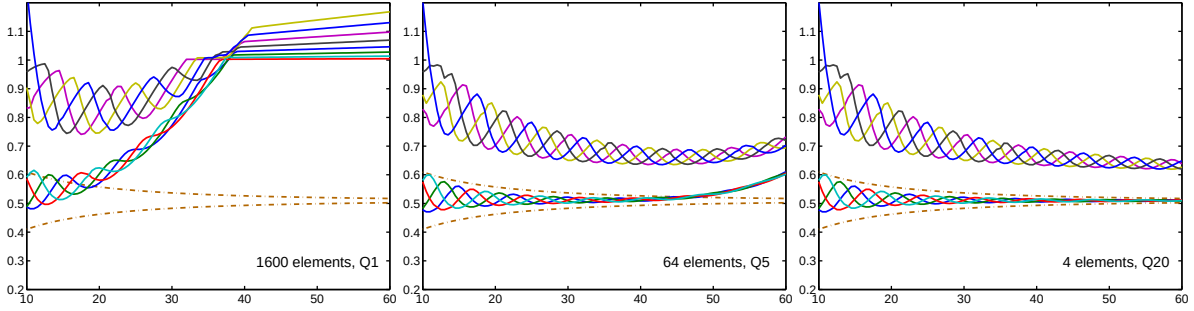


FIGURE 1.5 – $h^{-1}\mu_{h,n}$ vs. h^{-1} pour 1600 DDL.

Les Figures 1.6 et 1.7 illustrent les résultats théoriques des Théorèmes 1.3.3 et 1.3.4 concernant les développements asymptotiques des premiers modes propres. La localisation des vecteurs propres au voisinage de certains coins du domaine est clairement illustrée par les résultats numériques. Ces calculs permettent d'observer les modes propres de $P_{h,A}$ pour différents domaines tels qu'un carré, un losange, un trapèze. Les calculs haut degré ont permis d'obtenir une précision quasi-inaccessible par raffinement de maillage et une approximation de bas degré (1 ou 2).

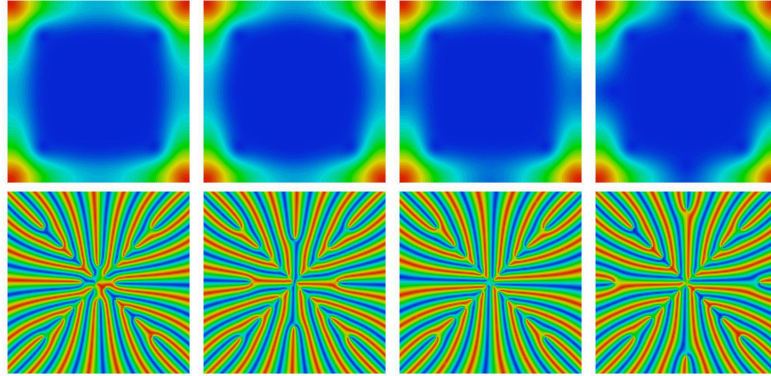


FIGURE 1.6 – Modules et phases des quatre premiers vecteurs propres, $h = 0.02$.

Dans le cas des polygones curvilignes et d'un potentiel magnétique à champ non constant, nous obtenons le développement des modes propres $(\mu_{h,n}, u_{h,n})$ en puissance de $h^{1/2}$ (cf. [BD06, Théorèmes 7.1 et 7.4]). La Figure 1.8 donne des exemples de simulations numériques sur des domaines curvilignes. D'autres simulations sont disponibles sur le site

<http://w3.bretagne.ens-cachan.fr/math/people/virginie.bonnaillie/Schrodinger/anim.html>

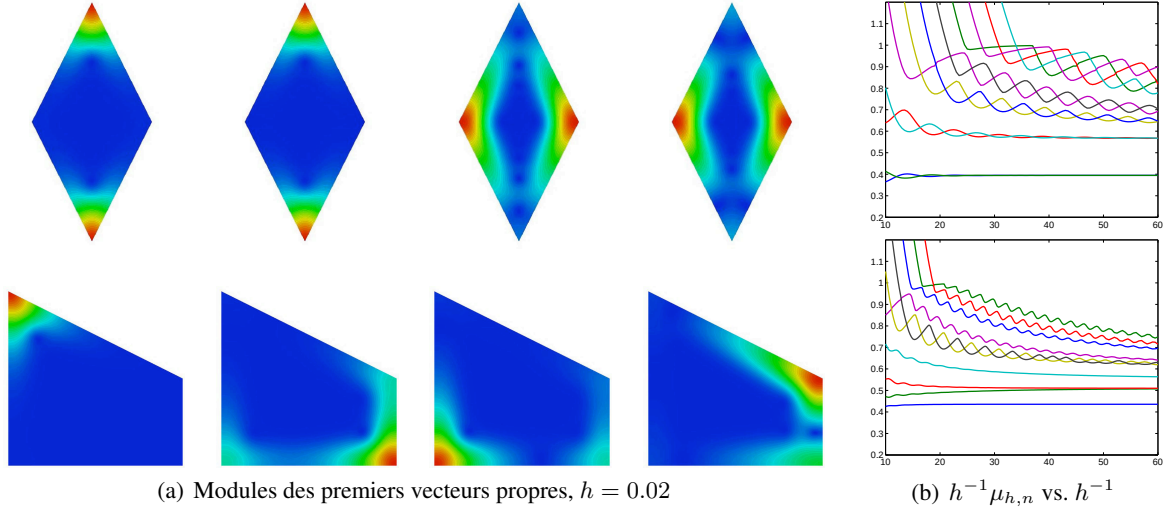
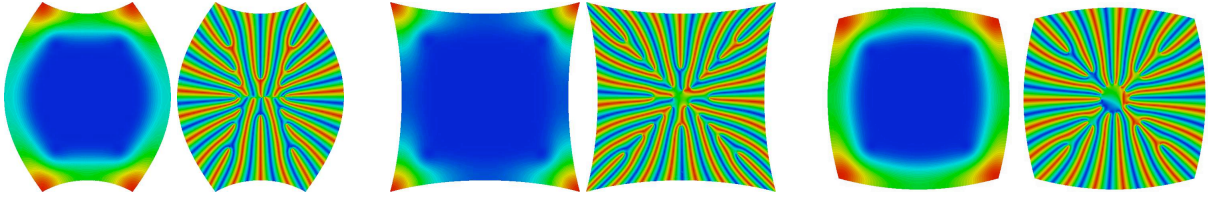


FIGURE 1.7 – Simulations numériques pour les modes propres de l'opérateur de Schrödinger.


 FIGURE 1.8 – Modules et phases du premier vecteur propre, $h = 0.02$.

1.4 Localisation de la supraconductivité

Il est bien connu que pour tout $\kappa, H > 0$, la fonctionnelle $\mathcal{E}_{\kappa,H}$ possède un minimiseur. Un résultat important de Giorgi et Phillips [GP02] établit que pour κ fixé et H assez grand (dépendant de κ), le système d'Euler-Lagrange (1.1.2) a une solution unique (à un changement de jauge près) qui vaut $(\psi, \mathcal{A}) = (0, \mathcal{A}_0)$. Cette solution correspond à l'état normal, pour lequel le matériau n'est pas supraconducteur.

Le but de cette section est de déterminer le champ critique pour lequel apparaît la supraconductivité et de déterminer la localisation du paramètre d'ordre qui rend compte de la densité des électrons supraconducteurs. Une première notion mathématique du champ critique apparaît dans [LP99]. On définit le champ sous-critique $\underline{H}_{C_3}$ qui est la plus basse intensité H pour laquelle la transition a lieu :

$$\underline{H}_{C_3}(\kappa) = \inf\{H > 0 : (0, \mathcal{A}_0) \text{ est un minimiseur de } \mathcal{E}_{\kappa,H}\}. \quad (1.4.1)$$

Comme il n'y a *a priori* pas de raison que la transition ait lieu en une unique valeur de l'intensité H , on peut définir un champ sur-critique :

$$\overline{H}_{C_3}(\kappa) = \inf\{H > 0 : (0, \mathcal{A}_0) \text{ est l'unique minimiseur de } \mathcal{E}_{\kappa,H'} \text{ pour tout } H' > H\}. \quad (1.4.2)$$

Dans le cas d'un domaine Ω régulier, [FH06a, FH10] montrent que les champs sous- et sur-critiques sont égaux et en donnent un développement asymptotique complet

$$H_{C_3}(\kappa) = \frac{\kappa}{\Theta_0} \left(1 + \frac{C_1 k_{max}}{\sqrt{\Theta_0} \kappa} - C_1 \sqrt{\frac{3k_2}{2}} \kappa^{-\frac{3}{2}} + \kappa^{-\frac{7}{4}} \sum_{j=0}^{\infty} \eta_j \kappa^{-\frac{j}{4}} \right) \quad \text{lorsque } \kappa \rightarrow +\infty,$$

1.5 Opérateur de Schrödinger en dimension 3

avec $C_1 = \Phi_{\zeta_0}^2(0)/3$ et k_{max} la courbure maximale de Ω . Ils montrent également que le minimiseur ψ est localisé au point de courbure maximale de Ω lorsque ce point est unique.

La quantité k_{max} est « infinie » lorsqu'on considère des domaines à coins et l'asymptotique du champ critique en est donc modifiée. Pan [Pa02] a donné le premier terme de l'asymptotique pour un rectangle :

$$H_{C_3}(\kappa) = \frac{\kappa}{\mu_1(\frac{\pi}{2})} + \mathcal{O}(1) \quad \text{lorsque } \kappa \rightarrow +\infty.$$

En collaboration avec S. Fournais, nous avons utilisé les résultats établis sur le problème spectral linéaire afin d'obtenir des résultats sur la fonctionnelle de Ginzburg-Landau. Nous avons établi dans [BF07] l'asymptotique complète du champ critique $H_{C_3}(\kappa)$ pour un polygone (curviline) Ω :

Théorème 1.4.1. *Avec les Notations 1.3.1, on suppose que pour tout $s \in \Sigma$, $\alpha_s \in (0, \pi)$ et $\mu_1(\alpha_s) < \Theta_0$. Alors il existe une suite de réels $(\eta_j)_{j \geq 1}$ telle que*

$$\underline{H}_{C_3}(\kappa) = \overline{H}_{C_3}(\kappa) = H_{C_3}(\kappa) \sim \frac{\kappa}{\min_{s \in \Sigma} \mu_1(\alpha_s)} \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \eta_j \kappa^{-j} \right) \quad \text{lorsque } \kappa \rightarrow +\infty.$$

Nous avons également établi une estimation précise de la localisation de l'apparition de la supraconductivité pour des champs magnétiques dont l'intensité est juste en dessous du champ critique. Comme le terme principal de l'asymptotique du champ critique H_{C_3} vaut κ/Θ_0 pour des domaines réguliers et qu'il vaut $\kappa/\min_{s \in \Sigma} \mu_1(\alpha_s)$ dans le cas de polygones curvilignes, ceci laisse une nouvelle zone de champs magnétiques pour laquelle le paramètre d'ordre ψ est localisé dans les coins du domaine.

Théorème 1.4.2. *Soit $\mu > 0$ tel que $\min_{s \in \Sigma} \mu_1(\alpha_s) < \mu < \Theta_0$. On note $\Sigma' := \{s \in \Sigma \mid \mu_1(\alpha_s) \leq \mu\}$. Il existe $\kappa_0, M, C, \varepsilon > 0$ tels que si $\kappa \geq \kappa_0$, $H\kappa^{-1} \geq \mu^{-1}$ et $(\psi, \mathcal{A})$ est un minimiseur de $\mathcal{E}_{\kappa, H}$, alors*

$$\int_{\Omega} e^{\varepsilon \sqrt{\kappa H} \text{dist}(x, \Sigma')} \left(|\psi(x)|^2 + \frac{1}{\kappa H} |(\nabla - i\kappa H \mathcal{A})\psi(x)|^2 \right) dx \leq C \|\psi\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

1.5 Opérateur de Schrödinger en dimension 3

Jusqu'à présent, la plupart des résultats dans le cadre tri-dimensionnel concernent les domaines réguliers (cf. [HM02, HM04, FH09, Ra10]) et précisent la localisation des premiers modes propres. L'orientation du champ magnétique intervient de manière cruciale dans les résultats. Dans le cas de domaine à coins, mentionnons le travail de Pan [Pa02] qui a travaillé sur les octants et cubes. Considérons maintenant un domaine de $\mathbb{R}^3$. Comme pour l'étude de domaine bi-dimensionnel, nous allons dégager des opérateurs modèles en étudiant l'opérateur de Schrödinger avec un champ magnétique constant sur des domaines modèles : l'espace, le demi-espace, les dièdres, les domaines avec un coin (comme l'octant) pour commencer. Dans la suite, le champ magnétique $\mathcal{B}_0$ est un vecteur unitaire de $\mathbb{R}^3$. Nous choisirons un potentiel de référence $\mathcal{A}_0$ tel que $\text{rot } \mathcal{A}_0 = \mathcal{B}_0$.

1.5.1 Demi-espace

Lu-Pan [LP00], Helffer-Morame [HM01], Fournais-Helffer [FH09, FH10] et Raymond [Ra10, Ra09] ont introduit l'opérateur que nous allons maintenant étudier. Nous avons amélioré les résultats de [Ra10] en précisant la localisation des vecteurs propres et le comportement des valeurs propres dans [BDPR10] et complété l'étude par des simulations numériques. Résumons ces résultats.

L'un des premiers modèles à étudier en dimension 3 est celui du demi-espace :

$$\mathbb{R}_+^3 := \{X = (X_1, X_2, X_3,) \in \mathbb{R}^3, X_1 > 0\}.$$

Quitte à changer de repère, on peut se ramener au champ magnétique constant

$$\mathcal{B}_0(\mathbf{X}) = (\sin \theta, \cos \theta, 0),$$

où $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$ représente l'angle entre le champ magnétique $\mathcal{B}_0$ et le plan $\{X_1 = 0\}$ ¹. On définit un potentiel magnétique associé $\mathcal{A}_0$:

$$\mathcal{A}_0(\mathbf{X}) = (0, 0, V_\theta(X_1, X_2)) \quad \text{avec} \quad V_\theta(X_1, X_2) = X_2 \sin \theta - X_1 \cos \theta.$$

Nous souhaitons donc déterminer le bas du spectre de la réalisation de Neumann de l'opérateur $D_{X_1}^2 + D_{X_2}^2 + (D_{X_3} + V_\theta)^2$ sur $\mathbb{R}_+^3$. Si $\theta = 0$, on se ramène à l'opérateur de de Gennes $H(\zeta)$ après une transformation de Fourier en X_3 et X_2 . Dans ce cas, on a

$$\inf \text{sp}_{\text{ess}}(\mathcal{L}_\theta) = \Theta_0 \quad \text{lorsque } \theta = 0.$$

Supposons désormais $\theta \neq 0$. On effectue alors une transformation de Fourier en X_3 et un changement de variables ramène l'étude du spectre à celle de l'opérateur

$$\mathcal{L}_\theta = D_{X_1}^2 + D_{X_2}^2 + (X_1 \cos \theta - X_2 \sin \theta)^2,$$

avec condition de Neumann sur le demi-plan $G^\pi = \{(X_1, X_2) \in \mathbb{R}^2, X_1 > 0\}$. Le paramètre θ représente donc l'angle entre le bord de G^π et la demi-droite d'équation $X_1 \cos \theta = X_2 \sin \theta$ où le potentiel $(X_1 \cos \theta - X_2 \sin \theta)^2$ atteint son minimum.

On note $\sigma_n(\theta)$ la n^{e} valeur propre de l'opérateur $\mathcal{L}_\theta$ donnée par le principe du min-max et $\text{sp}_{\text{ess}}(\mathcal{L}_\theta)$ son spectre essentiel. D'après [HM02, LP00], on a les propriétés suivantes :

Proposition 1.5.1. *On suppose $\theta \neq 0$. Alors*

- $\text{sp}_{\text{ess}}(\mathcal{L}_\theta) = [1, +\infty)$,
- σ_n est croissant sur $(0, \frac{\pi}{2}]$ pour tout entier n ,
- σ_1 est une valeur propre simple et strictement croissante avec $\sigma_1(\theta) < 1$.

Ce dernier résultat prouve l'existence de spectre discret. Grâce au théorème de Persson et aux estimées d'Agmon, on peut montrer, de façon assez classique, que les fonctions propres associées au spectre discret décroissent exponentiellement à l'infini. Nous avons précisé ces comportements à l'aide d'une propriété de décroissance uniforme dans la direction transverse à la ligne de minimum du potentiel, et, si $\sigma_n(\theta) \leq \eta < 1$, une décroissance uniforme par rapport à η dans la direction transverse au bord du domaine :

Théorème 1.5.2. *On suppose $\theta \neq 0$. Soit $(\sigma(\theta), u_\theta)$ un mode propre de $\mathcal{L}_\theta$ avec $\sigma(\theta) < 1$. Alors :*

$$\forall \alpha \in (0, \sqrt{1 - \sigma(\theta)}), \quad \exists C_1(\alpha, \theta) > 0, \quad \|e^{\alpha \sqrt{X_1^2 + X_2^2}} u_\theta\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1 \|u_\theta\|_{L^2(\Omega)}, \quad (1.5.1)$$

$$\forall \beta \in (0, \frac{1}{2}), \quad \exists C_2(\beta) > 0, \quad \|e^{\beta V_\theta} u_\theta\|_{L^2(\Omega)} \leq C_2 \|u_\theta\|_{L^2(\Omega)}, \quad (1.5.2)$$

$$\forall \eta < 1, \forall \gamma \in (0, \sqrt{1 - \eta}), \quad \exists C_3(\eta, \gamma), \quad \left\{ \sigma(\theta) \leq \eta \Rightarrow \|e^{\gamma X_1} u_\theta\|_{L^2(\Omega)} \leq C_3 \|u_\theta\|_{L^2(\Omega)} \right\}, \quad (1.5.3)$$

$$\exists C_4 > 0, \exists \theta_1 > 0, \quad \forall \theta \in (0, \theta_1], \quad \|e^{X_2 \sqrt{\sin \theta} - \frac{\zeta_0}{\sqrt{\tan \theta}}} u_\theta\|_{L^2(\Omega)} \leq C_4 \|u_\theta\|_{L^2(\Omega)}. \quad (1.5.4)$$

La Figure 1.9 illustre ces propriétés de décroissance dans les variables (X_2, X_1) . L'angle $\theta \in (0, \frac{\pi}{2})$ représente donc l'angle entre l'axe horizontal et la droite d'équation $X_1 \cos \theta = X_2 \sin \theta$. Nous avons

1. Pour plus de cohérence avec les autres sections de ce chapitre et notamment la Section 1.5.2, nous avons choisi d'autres notations que celles de l'article [BDPR10] en effectuant le changement de variables $(X_1, X_2, X_3) = (t, s, r)$.

1.5 Opérateur de Schrödinger en dimension 3

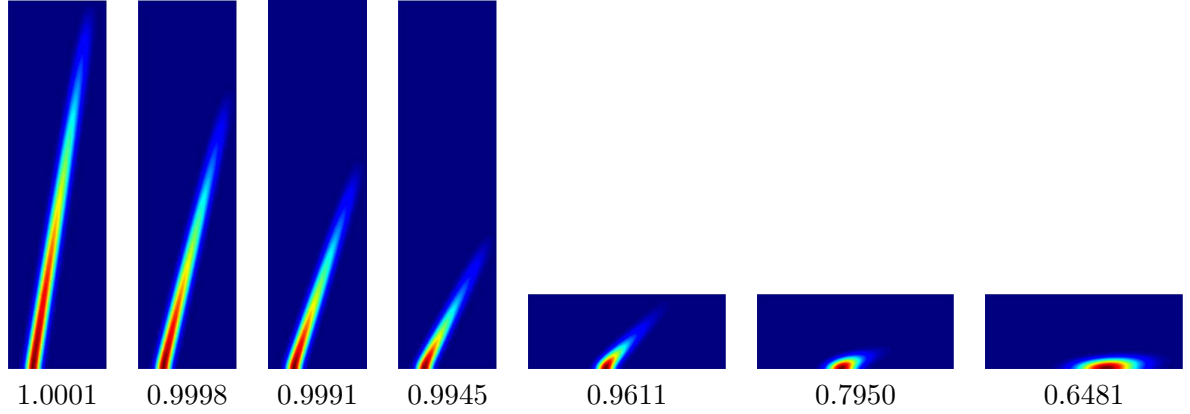


FIGURE 1.9 – Premier mode propre de $\mathcal{L}_\theta$ pour $\theta = \frac{\vartheta\pi}{20}$ avec $\vartheta = 9, 8.5, 8, 7, 5, 2$, et 0.5 . Les vecteurs propres sont représentés dans le repère (X_2, X_1) .

représenté le premier vecteur propre de $\mathcal{L}_\theta$ pour différentes valeurs de θ , calculé à l'aide de la méthode des éléments finis. Le domaine de calcul est $[-5, 15] \times [0, 75]$ pour $\theta > \pi/4$ et $[-15, 25] \times [0, 15]$ pour $\theta \leq \pi/4$. L'anisotropie de la décroissance est très nette.

Après un changement de variables adéquat

$$x = X_1 \sqrt{\cos \theta}, \quad y = X_2 \sqrt{\sin \theta} - \frac{\zeta_0}{\sqrt{\tan \theta}}, \quad (1.5.5)$$

l'opérateur $\mathcal{L}_\theta$ devient :

$$-\sin \theta \partial_y^2 - \cos \theta \partial_x^2 + \cos \theta (x - \zeta_0 - y \sqrt{\tan \theta})^2,$$

où $(x, y) \in Q^\pi$. Notons Φ_ζ un vecteur propre associé à $H(\zeta)$ (cf. Section 1.2.1) et ψ_j la j^e fonction d'Hermite. En considérant le quotient de Rayleigh des fonctions orthogonales $(X_1, X_2) \mapsto \Phi_{\zeta_0}(x) \psi_j(y)$, nous montrons la majoration de $\sigma_n(\theta)$:

$$\sigma_n(\theta) \leq \Theta_0 \cos \theta + (2n - 1) \sin \theta, \quad n \geq 1, \quad \theta \in (0, \frac{\pi}{2}).$$

Le nombre de valeurs propres sous le spectre essentiel tend donc vers l'infini lorsque l'angle θ tend vers 0. Nous avons aussi montré un résultat de densité au sens suivant :

Théorème 1.5.3.

$$\forall \lambda_0 \in (\Theta_0, 1), \forall \varepsilon > 0, \exists \theta_1 > 0, \forall \theta \in (0, \theta_1], d(\lambda_0, \text{sp}(\mathcal{L}_\theta)) < \varepsilon.$$

Lorsque $\theta \rightarrow 0$, l'estimation (1.5.4) montre que les modes propres de $\mathcal{L}_\theta$ sont uniformément localisés dans une couche horizontale au dessus du bord et se concentrent autour du point $(s_0(\theta), 0)$ avec $s_0(\theta) = \zeta_0 \sqrt{\cos \theta} / \sin \theta$. Ainsi $s_0(\theta) \rightarrow \infty$ quand $\theta \rightarrow 0$, ce qui contredit toute estimation uniforme. Lorsque $\theta \rightarrow 0$, nous pouvons donner une asymptotique à deux termes des valeurs et vecteurs propres de $\mathcal{L}_\theta$. Le changement de variables (1.5.5) permet d'écrire $\mathcal{L}_\theta = \cos \theta (\mathcal{L}_h + \Theta_0)$ avec $h = \tan \theta$ et

$$\mathcal{L}_h := -h \partial_y^2 + \left[D_x^2 + (x - \zeta_0 - y \sqrt{h})^2 \right] - \Theta_0.$$

Le comportement de $\sigma_n(\theta)$, quand $\theta \rightarrow 0$, est donc donné par celui de la n^e valeur propre de $\mathcal{L}_h$ lorsque $h \rightarrow 0$. L'approximation de Born-Oppenheimer consiste alors à remplacer l'opérateur de de Gennes $H(\zeta_0 + y \sqrt{h})$ par son état fondamental $\mu_{1,H}(\zeta_0 + y \sqrt{h})$ et nous pouvons démontrer :

Théorème 1.5.4. *Pour tout $N \geq 1$, il existe $h_0 > 0$ et $C(N) > 0$ tels que pour tout $0 < \theta \leq h_0$ et $1 \leq n \leq N$:*

$$\left| \sigma_n(\theta) - \left(\Theta_0 + \theta \sqrt{\frac{\mu''_{1,H}(\zeta_0)}{2}} (2n-1) \right) \right| \leq C(N) \theta^{3/2}. \quad (1.5.6)$$

Notons, en utilisant le changement de variables (1.5.5), $\tilde{u}_n^b(h)$ et $\tilde{u}_n^\sharp(h)$ les n^e quasi-modes à un et deux termes :

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{n,\theta}^b(X_1, X_2) &= \psi_{n-1} \left(\left[\frac{\mu''_{1,H}(\zeta_0)}{2} \right]^{1/4} y \right) \Phi_{\zeta_0}(x), \\ \tilde{u}_{n,\theta}^\sharp(X_1, X_2) &= \psi_{n-1} \left(\left[\frac{\mu''_{1,H}(\zeta_0)}{2} \right]^{1/4} y \right) \left(\Phi_{\zeta_0}(x) + h^{1/2} y \partial_\zeta \Phi_\zeta|_{\zeta=\zeta_0}(x) \right). \end{aligned}$$

Alors

$$\|u_{n,\theta} - \tilde{u}_{n,\theta}^b\|_{L^2(\Omega)} \leq C \theta^{1/2} \|u_{n,\theta}\|_{L^2(\Omega)} \quad \text{et} \quad \|u_{n,\theta} - \tilde{u}_{n,\theta}^\sharp\|_{L^2(\Omega)} \leq C \theta \|u_{n,\theta}\|_{L^2(\Omega)}.$$

Les simulations numériques de [BDPR10] laissent supposer un développement asymptotique de $\sigma_n(\theta)$ plus fin que celui démontré en (1.5.6), à savoir un développement en puissance entière de θ de la forme :

$$\sigma_n(\theta) = \Theta_0 + \theta \sqrt{\frac{\mu''_{1,H}(\zeta_0)}{2}} (2n-1) - a_{n,2} \theta^2 - a_{n,3} \theta^3 + o(\theta^3).$$

La Figure 1.10 montre les comportements des premières valeurs propres $\sigma_n(\theta)$ calculées à l'aide de la librairie d'éléments finis MÉLINA, [Ma07].

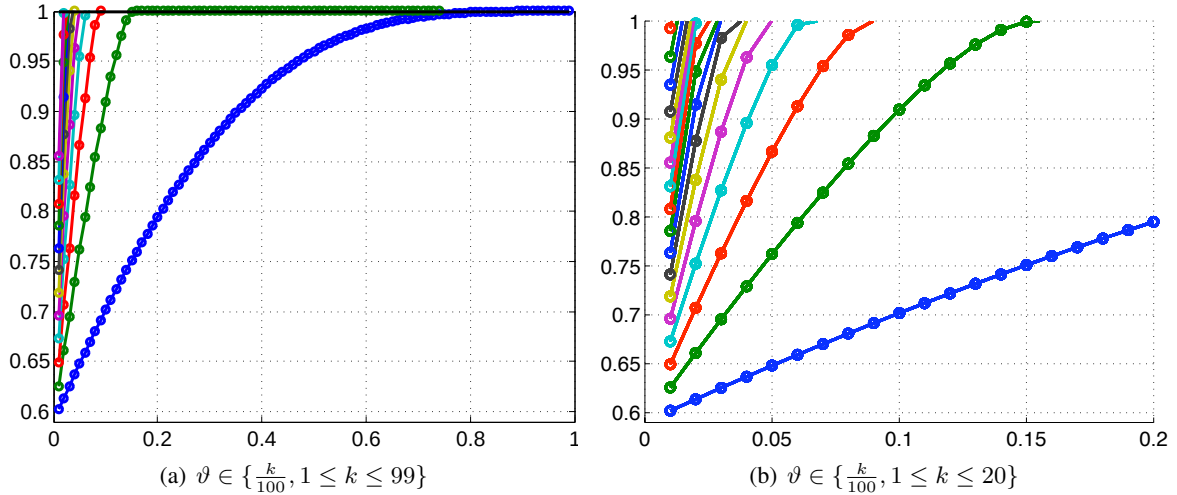


FIGURE 1.10 – Approximation $\sigma_n(\theta)$ pour $\theta = \frac{\pi}{2} \vartheta$.

Dans [BDPR10], nous traçons les graphes des fonctions propres $u_{n,\theta}$ ainsi que les quasi-modes $\tilde{u}_{n,\theta}^b$ et $\tilde{u}_{n,\theta}^\sharp$ pour $1 \leq n \leq 8$ et $\theta = 0.0125\pi$. Nous représentons à la Figure 1.11 les vecteurs propres $u_{n,\theta}$ et les quasi-modes à deux termes $\tilde{u}_{n,\theta}^\sharp$.

1.5 Opérateur de Schrödinger en dimension 3

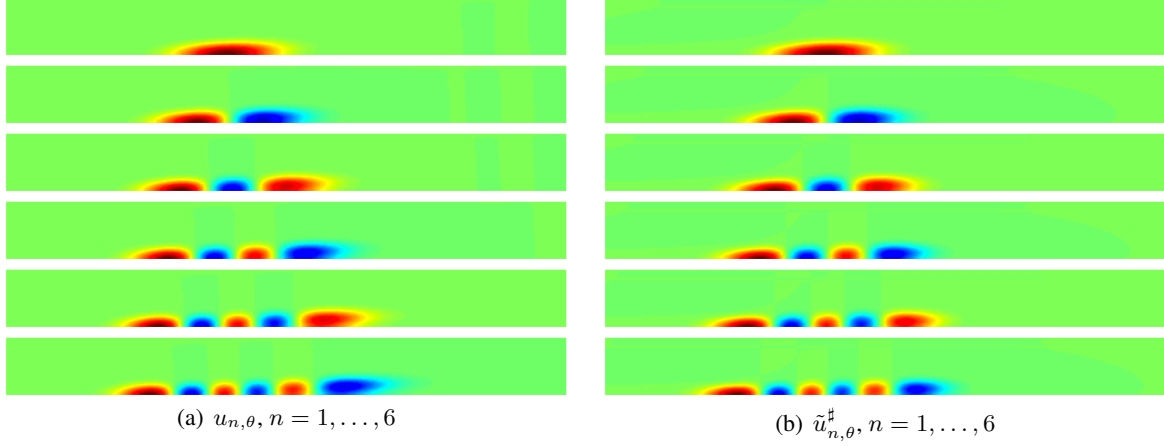


FIGURE 1.11 – Premiers vecteurs propres $u_{n,\theta}$ de $\mathcal{L}_\theta$ et quasi-modes $\tilde{u}_{n,\theta}^\sharp$ dans le repère (X_2, X_1) pour $\theta = 0.0125\pi$.

1.5.2 Dièdre

Dans le cadre de la thèse de N. Popoff [Po], nous avons commencé l'étude d'un premier domaine à coin en dimension 3 : le dièdre. Notons, pour $\alpha \in (0, \pi]$ le dièdre d'angle α :

$$\Omega^\alpha = \{(X_1, X_2, X_3) \in \mathbb{R}^3, X_1 > 0, |X_2| < X_1 \tan \frac{\alpha}{2}\} = \{(X_1, X_2, X_3) \in G^\alpha \times \mathbb{R}\},$$

où G^α est le secteur angulaire de $\mathbb{R}^2$ défini en (1.2.1).

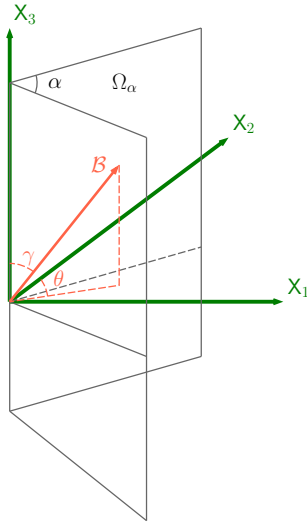


FIGURE 1.12 – Modèle du dièdre.

On considère le champ magnétique constant

$$\mathcal{B}_0(X) = (\sin \theta \sin \gamma, \cos \theta \sin \gamma, \cos \gamma),$$

et un potentiel de référence associé $\mathcal{A}_0$:

$$\mathcal{A}_0(X) = \left(-\cos \gamma \frac{X_2}{2}, \cos \gamma \frac{X_1}{2}, \sin \gamma (\sin \theta X_2 - \cos \theta X_1) \right).$$

L'angle γ représente l'angle entre $\mathcal{B}$ et l'arête du dièdre : $\gamma = (\mathbf{X}_3, \mathcal{B})$. L'angle θ représente l'angle entre l'axe $\mathbf{X}_2$ et la projection du champ $\mathcal{B}$ sur le plan $(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2)$ (cf. Figure 1.12). On considère la réalisation de Neumann sur Ω^α de l'opérateur

$$\left(D_{\mathbf{X}_1} + \frac{\mathbf{X}_2}{2} \cos \gamma\right)^2 + \left(D_{\mathbf{X}_2} - \frac{\mathbf{X}_1}{2} \cos \gamma\right)^2 + (D_{\mathbf{X}_3} - \sin \gamma (\sin \theta \mathbf{X}_2 - \cos \theta \mathbf{X}_1))^2.$$

Une transformation de Fourier en $\mathbf{X}_3$ conduit à étudier la famille d'opérateurs :

$$L_{\gamma, \theta, \alpha, \tau} := \left(D_{\mathbf{X}_1} + \frac{\mathbf{X}_2}{2} \cos \gamma\right)^2 + \left(D_{\mathbf{X}_2} - \frac{\mathbf{X}_1}{2} \cos \gamma\right)^2 + (\tau - \sin \gamma (\sin \theta \mathbf{X}_2 - \cos \theta \mathbf{X}_1))^2 \text{ sur } G^\alpha.$$

Notons $\sigma(\gamma, \theta, \alpha, \tau)$ le bas du spectre de cet opérateur. Il est intéressant de comprendre le comportement de $\inf_{\tau \in \mathbb{R}} \sigma(\gamma, \theta, \alpha, \tau)$ en fonction de l'orientation du champ $\mathcal{B}_0$, c'est-à-dire en fonction de γ et θ . Lu-Pan [LP00] et Pan [Pa02] ont donné quelques éléments de réponses dans le cas $\alpha = \frac{\pi}{2}$.

Pour des angles α quelconques, on a commencé à étudier le comportement $\tau = 0$ (N. Popoff travaille en ce moment sur le cas τ quelconque). On obtient alors l'opérateur

$$\mathcal{L}_{\gamma, \theta, \alpha} := \left(D_{\mathbf{X}_1} + \frac{\mathbf{X}_2}{2} \cos \gamma\right)^2 + \left(D_{\mathbf{X}_2} - \frac{\mathbf{X}_1}{2} \cos \gamma\right)^2 + \sin^2 \gamma (\sin \theta \mathbf{X}_2 - \cos \theta \mathbf{X}_1)^2 \text{ sur } G^\alpha.$$

Lorsque $\gamma = 0$, on retrouve l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique Q^α étudié en Section 1.2.3 (cf. (1.2.4)). Lorsque $\gamma = \frac{\pi}{2}$, on obtient un opérateur de Schrödinger avec un potentiel électrique V_θ comme dans la Section 1.5.1 dans le cas $\alpha = \pi$.

Lorsque $\theta = \frac{\pi}{2}$, N. Popoff [Po] a montré le comportement asymptotique

$$\sigma(\gamma, \frac{\pi}{2}, \alpha, 0) = \frac{\alpha}{\sqrt{3}} + \mathcal{O}(\alpha^3) \quad \text{quand } \alpha \rightarrow 0,$$

généralisant ainsi l'étude de Q^α . On remarque que le premier terme est indépendant de γ . La Figure 1.13 donne le comportement de $\sigma(\gamma, \frac{\pi}{2}, \alpha, 0)$ en fonction de α et γ . La Figure 1.14 montre le comportement

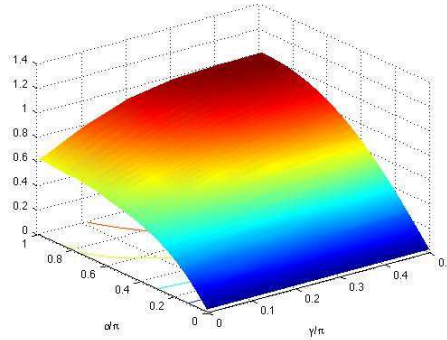


FIGURE 1.13 – $(\gamma, \alpha) \mapsto \sigma(\gamma, \frac{\pi}{2}, \alpha, 0)$, $\frac{\gamma}{\pi} \in \{\frac{k}{10}, 1 \leq k \leq 5\}$ et $\frac{\alpha}{\pi} \in \{\frac{j}{100}, 1 \leq j \leq 99\}$.

du module du premier vecteur propre de $\mathcal{L}_{\gamma, \theta, \alpha}$ pour $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\alpha = 0.4\pi$ et $\frac{\gamma}{\pi} \in \{k/10, 0 \leq k \leq 5\}$. On retrouve la localisation dans le coin avec une décroissance plus rapide lorsque $\gamma = 0$ correspondant à l'opérateur Q^α et un étalement du module le long de la ligne d'annulation du potentiel $\mathbf{X}_2 = 0$ lorsque γ augmente. Ces simulations ont été effectuées par une méthode d'éléments finis en imposant une condition de Dirichlet sur les bords artificiels.

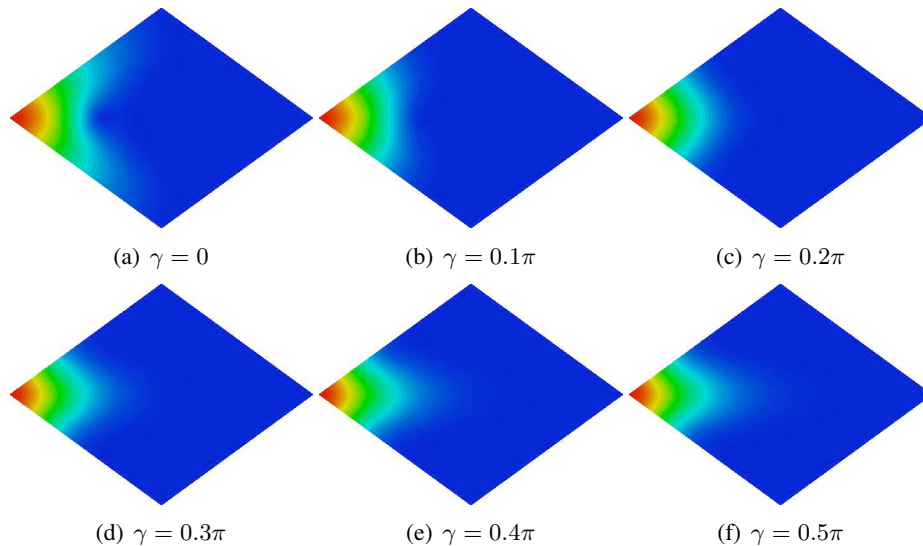


FIGURE 1.14 – Module du premier vecteur propre de $\mathcal{L}_{\gamma, \frac{\pi}{2}, 0.4\pi}$ pour $\frac{\gamma}{\pi} \in \{\frac{k}{10}, 0 \leq k \leq 5\}$.

1.6 Perspectives

L'un des premiers objectifs est de poursuivre l'étude des domaines à coins en dimension 3 en regardant la dépendance du bas du spectre de $L_{\gamma, \theta, \alpha, \tau}$ en fonction du paramètre τ . Cette étude nous apportera les éléments utiles pour déterminer l'asymptotique du champ critique $H_{C_3}(\kappa)$ pour des domaines de $\mathbb{R}^3$ présentant des arêtes. Il faut également compléter cette étude pour celle d'opérateurs de Schrödinger dans des domaines à coin dans $\mathbb{R}^3$, tels que l'octant.

La Conjecture 1.2.6 reste ouverte et nous souhaiterions démontrer ce résultat. Ce résultat permettrait, en particulier, d'énoncer plus simplement la localisation du paramètre d'ordre en fonction de l'ouverture aux sommets et non en fonction des valeurs propres des opérateurs modèles.

Chapitre 2

Modèle de transport quantique dans les semi-conducteurs

Ce chapitre fait la synthèse des articles [BNP06, BNP08, BNP09, BFN09] avec Ali Faraj, Francis Nier et Yassine Patel. L'étude théorique a été principalement menée par F. Nier et Y. Patel dans [NP04, Pa05] et [BNP08, BNP09]. J'ai contribué à l'implémentation des résultats asymptotiques [BNP06] et à la comparaison de ce modèle avec un modèle complet [BFN09]. Comme je n'ai plus récemment travaillé sur cette thématique, j'ai choisi d'en faire une présentation succincte.

2.1 Modélisation

Le but de ce travail est de proposer des modèles simples pour décrire les phénomènes non-linéaires de transport d'électrons dans les diodes à effet tunnel résonnant (ou également dans les hétérostructures). On utilise un modèle de Schrödinger-Poisson et on souhaite en particulier qu'il permette de retrouver les phénomènes d'hystérésis mentionnés dans [JLPS95, PS96], de comprendre l'influence de la géométrie des dispositifs et surtout d'exhiber un algorithme efficace et rapide provenant de l'analyse asymptotique fine du système de Schrödinger-Poisson.

Commençons par donner le modèle dans les variables physiques. Dans les diodes à effet tunnel résonnant, le transport électronique s'effectue dans la direction transverse et se modélise par un système monodimensionnel. La masse m utilisée dans ce modèle est la masse effective $m = m_3$ dans cette direction transverse $\underline{x} = \underline{x}_3$. Le Hamiltonien quantique pour un électron s'écrit

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\underline{x}^2} + \mathcal{V}(\underline{x}), \quad \mathcal{V} = \underline{\mathcal{B}} + \mathcal{V}_0 + V_{NL}. \quad (2.1.1)$$

Le potentiel total $\mathcal{V}$ se décompose en un potentiel affine par morceaux $\underline{\mathcal{B}}$ représentant la différence de potentiel appliquée $-\underline{B}$,

$$\underline{\mathcal{B}}(\underline{x}) = -\underline{B} \left[\frac{\underline{x} - a}{b - a} 1_{[a,b]}(\underline{x}) + 1_{[b,+\infty)}(\underline{x}) \right],$$

un potentiel $\mathcal{V}_0$ pour décrire les barrières et les puits :

$$\mathcal{V}_0(\underline{x}) = V_0 1_{[a,b]}(\underline{x}) + \sum_{j=1}^N W_j(\underline{x}),$$

avec $V_0 > 0$ et les potentiels $W_j \in L^\infty(\mathbb{R})$ à support compact dans $[a, b]$, fixés tels que $-V_0 \leq W_j \leq 0$ (cf. Figure 2.1) et un potentiel non-linéaire positif V_{NL} qui rend compte de la répulsion électrostatique

2.1 Modélisation

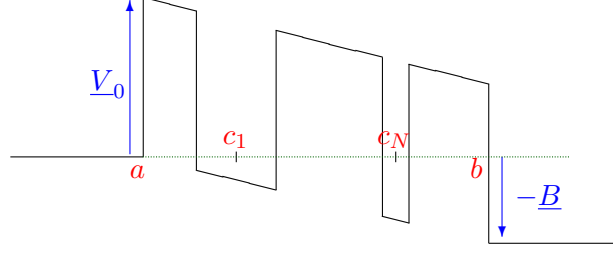


FIGURE 2.1 – Potentiel $\underline{B} + \underline{V}_0$.

dans une approximation de champ moyen à l'intérieur du dispositif $a \leq x \leq b$ et satisfait l'équation de Poisson

$$\begin{cases} -\Delta V_{NL} = \frac{q^2}{\varepsilon} \underline{n}, \\ V_{NL}(a) = V_{NL}(b) = 0, \end{cases} \quad (2.1.2)$$

où $\Delta = \frac{d^2}{dx^2}$, la densité de charges $\underline{n}$ sera définie en (2.1.4), ε est la permittivité diélectrique et q la charge élémentaire.

On décrit le faisceau d'électrons injectés de part et d'autre par une fonction $\underline{f}$ du moment $\underline{k} \neq 0$ et on suppose que le profil d'injection est le même des deux côtés :

$$\underline{f}(\underline{k}) = \underline{g}_+(\underline{k}^2) 1_{\mathbb{R}_+}(\underline{k}) + \underline{g}_-(\underline{k}^2 - B) 1_{\mathbb{R}_-}(\underline{k}) \quad \text{avec} \quad \underline{g}_+(E) = \underline{g}_0(E) \quad \text{et} \quad \underline{g}_-(E) = \underline{g}_0(E + B),$$

où k_B , T et $\underline{k}$ désignent respectivement la constante de Boltzmann, la température et le vecteur d'onde et $\underline{g}_0$ la statistique de Fermi-Dirac :

$$\underline{g}_0(\underline{k}^2) = \frac{\sqrt{m_1 m_2} k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m}}{k_B T} \right) \right), \quad (2.1.3)$$

avec le niveau de Fermi et la masse totale donnés par

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_D)^{2/3}, \quad m = (m_1 m_2 m_3)^{1/3}.$$

On définit maintenant les fonctions propres généralisées du système de Schrödinger-Poisson pour décrire la densité d'états stables. Les fonctions $\underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x})$ sont définies pour $\underline{k} > 0$ par

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) + \underline{V} \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) = \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m} \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) & \text{pour } \underline{x} \in \mathbb{R}, \\ \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) = e^{i \underline{k} \underline{x}} + R(\underline{k}) e^{-i \underline{k} \underline{x}} & \text{pour } \underline{x} \leq a, \\ \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) = T(\underline{k}) e^{i \sqrt{\underline{k}^2 + B} \underline{x}} & \text{pour } \underline{x} \geq b, \end{cases}$$

avec une formulation similaire pour $\underline{k} < 0$ (en échangeant $x \leq a$ et $x \geq b$ et remplaçant $\underline{k}$ par une racine carrée de $\underline{k}^2 - B$, cf. [BNP06]). La densité électronique $\underline{n}$ est alors donnée par

$$\underline{n}(\underline{x}) = \int_0^{+\infty} \underline{g}(\underline{k}^2) |\underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x})|^2 \frac{d\underline{k}}{2\pi} + \int_{-\infty}^0 \underline{g}(\underline{k}^2 - B) |\underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x})|^2 \frac{d\underline{k}}{2\pi}. \quad (2.1.4)$$

La densité de courant s'exprime par

$$\underline{J} = \frac{e \hbar}{m} \int_0^{+\infty} \frac{\underline{g}(\underline{k}^2)}{b-a} \int_a^b \text{Im} \left(\nabla \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) \overline{\underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x})} \right) d\underline{x} \frac{d\underline{k}}{2\pi}. \quad (2.1.5)$$

On effectue un adimensionnement du système en utilisant les variables

$$x = \frac{x-a}{b-a} \in [0, 1], \quad E = \frac{E}{E_F}, \quad V = \frac{V}{E_F}.$$

Le système non-linéaire de nouvelle inconnue V_{NL}^h se récrit

$$\left\{ \begin{array}{l} -h^2 \Delta \psi_-^h(k, x) + \mathcal{V}^h \psi_-^h(k, x) = k^2 \psi_-^h(k, x) \quad + \text{conditions transparentes en } x = 0 \text{ ou } 1, \\ \mathcal{V}^h(x) = \mathcal{B}(x) + \mathcal{V}_0^h(x) + V_{NL}^h(x), \\ \mathcal{B}(x) = -B [x 1_{[0,1]}(x) + 1_{[1,+\infty)}(x)], \\ \mathcal{V}_0^h(x) = V_0 1_{[0,1]}(x) - \sum_{j=1}^N W_j \left(\frac{x-c_j}{h} \right), \\ -\Delta V_{NL}^h = \gamma n \quad \text{avec} \quad V_{NL}^h(0) = V_{NL}^h(1) = 0, \\ n(x) = \int_0^{+\infty} g_0(k^2) |\psi_-^h(k, x)|^2 \frac{dk}{2\pi h} + \int_{-\infty}^0 g_0(k^2) |\psi_-^h(k, x)|^2 \frac{dk}{2\pi h}, \\ g_0(k^2) = \beta^{-1} \ln(1 + \exp(\beta(1 - k^2))). \end{array} \right. \quad (2.1.6)$$

Les paramètres du changement d'échelle sont

$$k = \frac{k\hbar}{\sqrt{2mE_F}}, \quad h = \frac{\hbar}{L\sqrt{2mE_F}}, \quad \beta = \frac{E_F}{k_B T}, \quad \gamma = \frac{4L}{a_B} \quad \text{et} \quad a_B = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon}{\sqrt{m_1 m_2} q^2}.$$

La densité de courant s'exprime par

$$J = \int_0^{+\infty} g(k^2) \operatorname{Im} \left(\int_0^1 \frac{d\psi_-^h(k, x)}{dx} \overline{\psi_-^h(k, x)} dx \right) \frac{dk}{2\pi h}. \quad (2.1.7)$$

Avec les valeurs physiques, la constante h est de l'ordre de 0.2 et n'est pas très petite. Nous verrons que le modèle asymptotique est néanmoins pertinent.

2.2 Résultats théoriques

Le modèle réduit est obtenu en prenant la limite $h \rightarrow 0$ dans le système adimensionné (2.1.6). Pour établir les résultats de [NP04, BNP08, BNP09], quelques hypothèses supplémentaires simplifient l'étude mathématique sans pour autant remettre en cause les principaux phénomènes. Une étude asymptotique raffinée serait toutefois intéressante pour relaxer ces hypothèses et mieux respecter le modèle physique. On suppose que l'injection ne se fait que d'un côté et que la fonction g_0 est positive à support compact inclus dans $[\Lambda_*, \Lambda^*] \subset (0, V_0 - B)$ (cf. [BNP08] pour les hypothèses précises). On montre alors :

Théorème 2.2.1. *La famille $(V_{NL}^h)_{h \in (0,1)}$ est uniformément bornée dans $W^{1,\infty}([0, 1])$. Après extraction d'une sous-suite,*

$$V_{NL}^{h'} \rightarrow V \quad \text{dans} \quad C^{0,\alpha}([0, 1]), \quad 0 < \alpha < 1.$$

Pour exhiber un modèle simplifié, nous devons préciser le comportement des limites possibles du potentiel non linéaire V_{NL}^h en limite semi-classique $h \rightarrow 0$. Donnons quelques définitions.

2.2 Résultats théoriques

Définition 2.2.2.

- Si $V = \lim_{h \rightarrow 0} V_{NL}^h$, on note $\tilde{V}$ le potentiel limite à puits bouchés :

$$\tilde{V}(x) = \mathcal{B}(x) + V_0 1_{[0,1]}(x) + V(x).$$

- Pour tout $j = 1, \dots, N$, on note $(-e_j^k)_{1 \leq k \leq K_j < +\infty}$ les valeurs propres négatives de l'opérateur de Schrödinger $H_j = -d^2/dx^2 + W_j(x)$ sur $\mathbb{R}$, rangées par ordre croissant. L'ensemble des énergies résonnantes est défini par

$$\mathcal{E} = \bigcup_{j=1}^N \mathcal{E}_j \quad \text{avec} \quad \mathcal{E}_j = \left\{ \tilde{V}(c_j) - e_j^k, 1 \leq k \leq K_j \right\}. \quad (2.2.1)$$

- Pour tout $E \in \mathbb{R}$, on pose

$$J^E := \{j \in \{1, \dots, N\} \mid E \in \mathcal{E}_j\}.$$

Si $j \in J^E$, on dit que le puits c_j est résonnant à l'énergie E .

- On pose

$$c_\ell^E := \min_{j \in J^E} c_j, \quad c_r^E := \max_{j \in J^E} c_j.$$

On notera plus simplement c^E quand $c_\ell^E = c_r^E$.

- Pour un potentiel $\Phi \in L^\infty([0, 1], \mathbb{R})$, on définit la distance d'Agmon

$$d_{Ag}(x, y; \Phi) = \left| \int_x^y \sqrt{\max\{\Phi(t), 0\}} dt \right|.$$

Pour une énergie résonnante $E \in \mathcal{E}$, on pose

$$\begin{aligned} \delta_\ell^E &:= d_{Ag}(c_r^E, 1; \tilde{V} - E) - d_{Ag}(0, c_r^E; \tilde{V} - E), \\ \delta_r^E &:= d_{Ag}(0, c_\ell^E; \tilde{V} - E) - d_{Ag}(c_\ell^E, 1; \tilde{V} - E). \end{aligned}$$

On remarque que $\delta_\ell^E > 0$ si et seulement si tous les puits résonnants à l'énergie E se situent sur la moitié gauche de l'île (plus proche de $x = 0$ que de $x = 1$) et $\delta_r^E > 0$ si et seulement si tous les puits résonnants à l'énergie E se situent sur la moitié droite de l'île (plus proche de $x = 1$ que de $x = 0$).

On montre que la densité électronique n admet une limite faible* dans l'ensemble $\mathcal{M}_b([0, 1])$ des mesures de Radon quand $h \rightarrow 0$. On peut préciser la forme des limites possibles de n et donc des limites possibles du potentiel non linéaire V_{NL}^h . On note $\mathbb{P}^1(\mathbf{c})$ l'ensemble des éléments finis $\mathbb{P}^1$ associés aux nœuds $\mathbf{c} = \{c_0, c_1, \dots, c_{N+1}\}$ avec $c_0 = 0, c_{N+1} = 1$. On définit l'ensemble

$$\mathbb{P}_0^1(\mathbf{c})_+ := \{V \in \mathbb{P}^1(\mathbf{c}), V \geq 0\}.$$

Théorème 2.2.3. L'ensemble $\mathcal{A}$ des limites possibles $h \rightarrow 0$ du potentiel non linéaire V_{NL}^h solution de (2.1.2) est un sous-ensemble de $\mathbb{P}_0^1(\mathbf{c})_+$. Si $V \in \mathcal{A}$, il vérifie l'équation de Poisson

$$\begin{cases} -\Delta V = \sum_{E \in \mathcal{E}} \sum_{j \in J^E} (t_j^E (g_+(E) - g_-(E)) + g_-(E)) \delta_{c_j}, \\ V(0) = V(1) = 0, \end{cases} \quad (2.2.2)$$

avec la convention que $(g_+ - g_-)(0)$ peut prendre toute valeur de $[0, (g_+ - g_-)(0^+)]$ et où les coefficients $t_j^E \in [0, 1]$ vérifient

- si $E < 0$, $t_j^E = 0$,

– si $E > 0$,

$$\begin{cases} \delta_\ell^E > 0 \Rightarrow t_j^E = 1, \forall j \in J^E, \\ \delta_r^E > 0 \Rightarrow t_j^E = 0, \forall j \in J^E. \end{cases} \quad (2.2.3)$$

On propose quelques discussions de cas générique ou critique dans [BNP06] et de calculs des coefficients t_j^E dans [BNP09]. On se ramène à des potentiels affines par morceaux. Les résultats théoriques montrent donc qu'asymptotiquement, quand $h \rightarrow 0$, le système complet (2.1.6) se réduit à une collection de systèmes non-linéaires simples. La description complète de cette collection de problèmes se fait par comparaison de distances d'Agmon. On peut voir que toute indétermination des coefficients t_j^E est compensée par une nouvelle équation (égalité de distance d'Agmon), celle de $(g_+ - g_-)(0)$ par l'égalité $E = 0$. Sur le modèle asymptotique, les inconnues se réduisent aux sauts des dérivées du potentiel dV/dx .

Les quantités caractéristiques du modèle sont : le paramètre h , la position des puits c_j qui sera calculée comme position moyenne dans les puits où se concentre la densité électronique, les niveaux d'énergie des états résonnants $-e_j^k$ et la distance d'Agmon.

2.3 Implémentation et validation du modèle asymptotique

On a besoin de connaître les fonctions propres généralisées pour déterminer $-e_j^k$ et c_j et calculer la densité de courant. On utilise une méthode de différences finies pour les calculer comme solution d'un problème avec conditions aux bords non homogènes. Pour $k > 0$, le système s'écrit

$$\begin{cases} -h^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi_-^h(k, x) + \mathcal{V}^h \psi_-^h(k, x) = k^2 \psi_-^h(k, x), \\ h \psi_-^{h'}(k, 0) + ik \psi_-^h(k, 0) = 2ik, \\ h \psi_-^{h'}(k, 1) - i\sqrt{k^2 + B} \psi_-^h(k, 1) = 0. \end{cases}$$

Ben Abdallah et Pinaud [BAP06, Pi03] ont proposé une méthode performante mais plus coûteuse pour calculer précisément les fonctions propres généralisées. On détecte les résonances en repérant les pics de densités locales dans chaque puits grâce à la formule de Breit-Wigner

$$M_j(E) = \int_{c_j^-}^{c_j^+} (|\psi_-^h(\sqrt{E}, x)|^2 + |\psi_-^h(-\sqrt{E+B}, x)|^2) dx.$$

La proximité des résonances détectées avec les valeurs propres de Dirichlet, cf. Figure 2.2, confirme que l'on peut considérer que l'on est en régime asymptotique. On peut donc utiliser des conditions aux limites de type Dirichlet pour calculer les fonctions propres généralisées. Supposons, pour simplifier

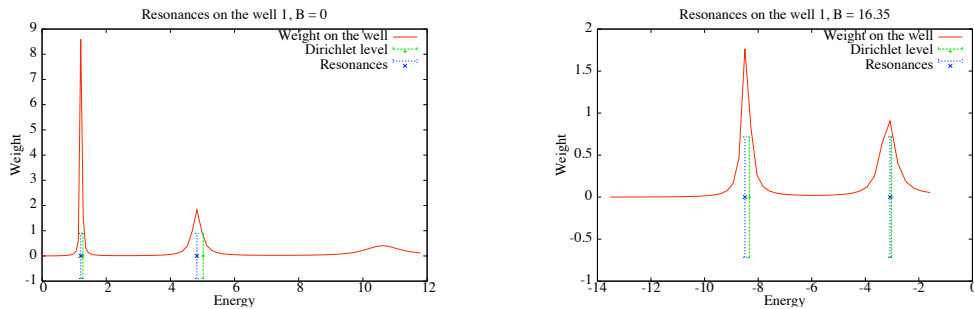


FIGURE 2.2 – Détermination des énergies résonnantes.

2.3 Implémentation et validation du modèle asymptotique

la présentation, que $K_j = 1$. Pour déterminer la position c_j des puits et e_j , on utilise la formule de Feynman-Hellman. On calcule les énergies résonnantes $E_j(B_{\min})$ et $E_j(B_{\max})$ dans le j^{e} puits pour deux valeurs de différence de potentiel $B_{\min}$ et $B_{\max}$ et on détermine e_j et c_j par l'équation linéaire :

$$E_j(B) = V_0 - Bc_j - e_j.$$

La densité de courant se calcule à l'aide de (2.1.7) pour les fonctions propres généralisées associées au potentiel non linéaire donné par le modèle asymptotique.

Comme on prend un potentiel affine par morceaux, le calcul des distances d'Agmon est complètement explicite (cf. [BNP06, §7]).

Il reste à déterminer les coefficients t_j . Pour cela, on utilise une méthode de pénalisation. On écrit

$$t_j = \tau_j \theta_j \quad \text{avec} \quad \theta_j = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{d_{Ag}(0, c_j; \mathcal{V} - E_j) - d_{Ag}(c_j, 1; \mathcal{V} - E_j)}{\varepsilon}\right)}.$$

Il faut choisir le paramètre de pénalisation $\varepsilon \in (0, h)$ et faire très attention à son influence. Pour chaque résonance, on distingue 3 cas :

$$\begin{aligned} E_j &= \tilde{\mathcal{V}}(c_j) - e_j > 0, & \tau_j &= 1, \\ E_j &= \tilde{\mathcal{V}}(c_j) - e_j < 0, & \tau_j &= 0, \\ E_j &= \tilde{\mathcal{V}}(c_j) - e_j = 0, & \tau_j &\in (0, 1). \end{aligned}$$

On procède maintenant à une méthode de continuation pour les 3^N cas correspondant aux 3 valeurs possibles de τ_j et aux N puits. On vérifie *a posteriori* les conditions $\tau_j \in [0, 1]$, $E_j > 0$, $E_j < 0$.

Présentons deux exemples, GaAs et Si-SiO (cf. [LKF04]). Les caractéristiques du dispositif sont données au Tableau 2.1. La Figure 2.3 permet de comparer notre modèle réduit dans le cas du Ga-GaAs avec un modèle complet. La Figure 2.4 présente les simulations pour Si-SiO et montre un diagramme présentant un phénomène d'hystérésis et des cas critiques.

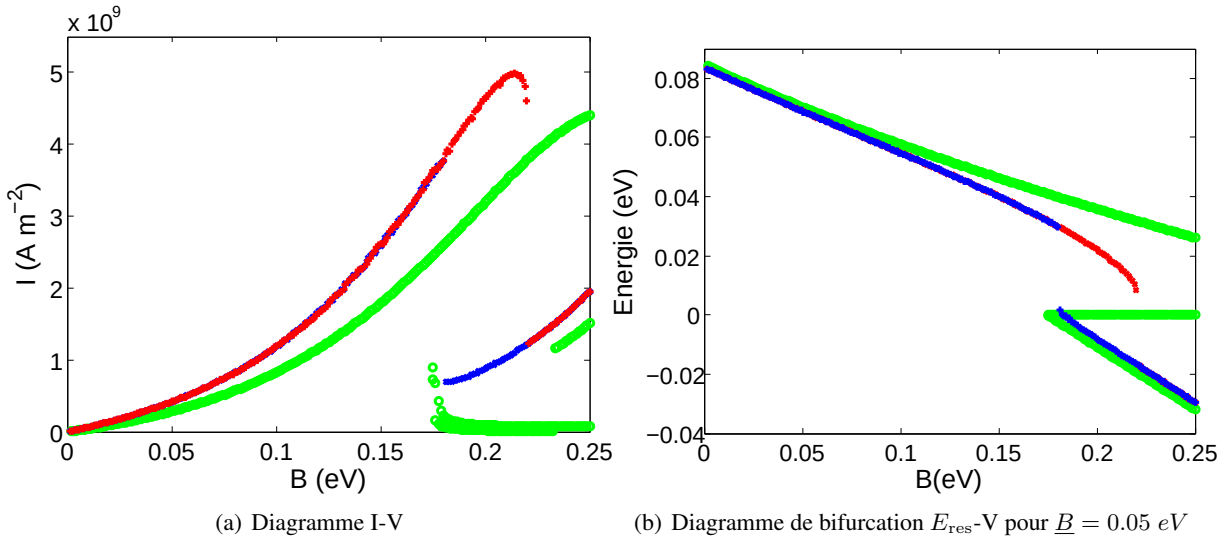


FIGURE 2.3 – Comparaison du modèle réduit et d'un modèle complet : modèle réduit (o), méthode de continuation en augmentant la DDP (+) et en la diminuant (x).

		Ga	Si
Densité (n_D)	cm^{-3}	10^{24}	5×10^{20}
Niveau de Fermi (E_F)	eV	0.054	0.716
B_{min}	eV	0	0
B_{max}	eV	0.25	2.5
Hauteur des barrières (V_0)	eV	0.3	3
Nombre de puits		1	2
Taille de la 1 ^e barrière	nm	3	0.5
Taille de la 2 ^e barrière	nm	6	0.5
Taille de la 3 ^e barrière	nm		0.55
Taille du 1 ^e puits	nm	6	1.5
Taille du 2 ^e puits	nm		1
$\hbar$		0.22	0.13
Paramètre de pénalisation (ε)		0.001	0.01
# de valeurs de tension (B)		100	100
# de valeurs du moment (k)		300	200
Nombre d'énergies résonnantes		1	2
Position du puits c_1	nm	6.3	1.2
Position du puits c_2	nm		3
e_1	eV	2.2	2.5
e_2	eV		2.1

TABLE 2.1 – Caractéristiques des dispositifs.

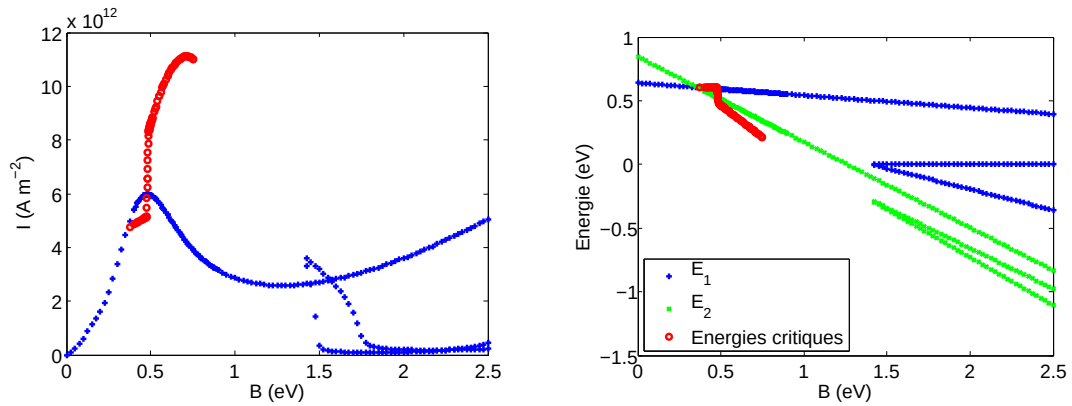


FIGURE 2.4 – Exemple d'hystérésis et de solutions critiques pour Si-SiO.

Nous avons réalisé des simulations numériques pour les composants GaAs et Si-SiO dans [BNP06, BFN09]. L'avantage de cette méthode est d'être très rapide (de l'ordre de la minute sur un ordinateur portable). Elle permet de déterminer rapidement des diagrammes *courant-tension* et de bifurcation. Ce modèle simplifié permet de tester très rapidement et de dégager des configurations de dispositifs réalistes intéressantes pour lesquelles il y a interaction entre les états résonnants et qui présentent des diagrammes de bifurcation complexes. Nous retrouvons des résultats très proches de ceux obtenus par des méthodes numériques beaucoup plus complexes basées sur le traitement complet du système de Schrödinger-Poisson dans l'approche de Landauer-Büttiker (cf. [BAP06, Pi03]). Dans [BFN09], nous avons comparé deux modèles pour le transport électronique :

- un modèle 1D de Schrödinger-Poisson avec un traitement numérique complet des états résonnants,

2.3 Implémentation et validation du modèle asymptotique

- un modèle réduit que nous avons déduit de l'analyse asymptotique précise du problème non-linéaire.

Nous avons montré la concordance tant au niveau qualitatif que quantitatif des deux modèles sur les diagrammes de bifurcation. Ce travail renforce l'intérêt des modèles asymptotiques réduits qui permettent d'obtenir des résultats très rapides pour une précision tout à fait raisonnable. Le calcul numérique complet ainsi qu'un tracé sans oubli des diagrammes de bifurcation a permis également d'ajuster la géométrie du potentiel pour faire apparaître des phénomènes rares tels que l'interaction d'états résonnants.

Chapitre 3

Analyse multi-échelle et numérique de problèmes elliptiques perturbés

Ce travail a été en partie réalisé dans le cadre du projet ANR jeunes chercheurs n° JCJC06-139561 MACADAM financé de 2006 à 2009. Il propose une synthèse des articles [BDTV07, BDTV09, BDHV10, BBDTV10, BDVV08, BBDHTV11, BDHV11, BBDTV11] avec Delphine Brancherie, Marc Dambrine, Frédéric Hérau, Sébastien Tordeux et Grégory Vial.

3.1 Introduction

Dans de nombreuses situations physiques, on est amené à considérer des objets dont la géométrie présente naturellement plusieurs échelles. Typiquement, à la description macroscopique s'ajoute un niveau de détail microscopique : c'est le cas de bulles de gaz au sein d'un matériau obtenu par fusion, de granulats dans un bloc de béton ou d'aspérités à la surface d'une carrosserie. Les questions auxquelles on souhaite répondre ont trait en particulier aux propriétés mécaniques de ces matériaux. La modélisation mathématique de telles situations consiste le plus souvent en un système d'équations aux dérivées partielles posées dans un domaine (2D ou 3D) représentant la géométrie réelle. Si les aspects théoriques ne sont généralement pas affectés par les inhomogénéités microscopiques, il n'en va pas de même des aspects numériques. En effet, la prise en compte des deux échelles dans un code de calcul (éléments finis, par exemple), impose un raffinement du maillage au voisinage des micro-défauts. Les calculs qui en résultent peuvent devenir très coûteux. Ainsi, seule la description macroscopique de l'objet est le plus souvent conservée dans les codes industriels. On omet alors l'influence des inhomogénéités locales sur le comportement global. Notre objectif est de proposer une méthode numérique qui prenne en compte les deux échelles géométriques, tout en conservant une efficacité raisonnable en temps de calcul.

Notre approche se base sur une analyse asymptotique fine de l'équation gouvernant le phénomène en fonction de la taille ε des micro-défauts. La solution limite quand ε tend vers 0 correspond à la solution dans le domaine sans défaut, celle-ci peut être calculée à moindre coût sur un maillage grossier. Dans le cadre de ce travail, la perturbation induite par les micro-défauts est essentiellement concentrée au voisinage de ceux-ci. Précisément, dans un cas modèle, on a montré que le premier terme correctif consiste en un profil, c'est-à-dire une fonction définie dans un domaine infini adimensionné, intervenant en la variable rapide x/ε , i.e. à l'échelle de la perturbation. Cette structure suggère une méthode numérique basée sur la superposition de la solution non perturbée et du profil. L'analyse et la mise en œuvre de cette méthode constituent un objectif majeur : les difficultés principales concernent le calcul effectif du profil et l'analyse numérique des performances de l'algorithme. Il s'agit, pour déterminer le profil, de résoudre une équation elliptique posée dans un domaine infini, à bord infini. Une fois le profil calculé, le profil

3.2 Développement asymptotique pour l'équation de Laplace

est ajouté à la solution non perturbée dans un patch d'éléments au voisinage du micro-défaut. L'utilisation pratique d'une telle méthode de superposition requiert une estimation précise des différentes erreurs commises et du coût de calcul. Notre travail a été initié lors d'une collaboration avec des mécaniciens. Il s'agit de prendre en compte l'influence des défauts surfaciques sur le comportement à rupture d'une structure en béton. La méthode de superposition multi-échelle présentée plus haut constitue la phase préliminaire de détection de fissure, à laquelle s'adjoint un modèle d'endommagement et de propagation développé précédemment par D. Brancherie dans [BI04, BDVV06, BDVV08, BI09].

Sur le plan de l'analyse mathématique, nos efforts ont porté principalement sur l'analyse asymptotique du problème perturbé. Il s'agit de justifier de manière complète les développements à la base de la méthode numérique de superposition. Nous avons traité en partie le cas modèle de l'opérateur de Laplace avec différentes conditions au bord. Un des enjeux majeurs a été d'étudier le cas de plusieurs micro-défauts proches les uns des autres, ce qui génère une nouvelle échelle correspondant à la distance entre deux aspérités. La coexistence des trois échelles rend cette question plus délicate ; techniquement, il s'agit de comprendre les interactions entre les différents profils en jeu. L'autre enjeu a été de calculer effectivement les profils. Pour cela, nous avons utilisé une méthode d'éléments finis avec troncature en proposant plusieurs conditions aux limites sur le bord artificiel.

Les problèmes faisant intervenir plusieurs échelles sont très nombreux. Les ouvrages [MNP00a, MNP00b] font référence dans ce domaine. On peut distinguer deux types de stratégies : développements asymptotiques multi-échelle [DNBL90, CD96, NO93, CDN10] ou développements raccordés [JT06]. Citons le travail de [TVD06, DTV10] qui propose une comparaison de ces deux méthodes. La théorie du potentiel [VV00, BHB06, ABCT08, AKL09, AKLZ10a, AKLZ10b, AGJ10, AKLP10, ABFFKL10] permet de traiter le cas de perturbations locales. Le cas des petites inclusions de domaines ou des inhomogénéités a été largement étudié, notamment dans le cadre de l'électromagnétisme ou des problèmes inverses, cf. [HJ01, LS00, NS03, AKLZ10b, CV03, VV00, BV00, BHB06, ABCT08] par exemple.

Nous commençons par énoncer les résultats de [BDTV09] concernant les développements asymptotiques pour l'équation de Laplace dans un domaine avec de petites perturbations intérieures ou au bord. Nous appliquons ensuite ces méthodes à l'équation de Navier dans le contexte de la mécanique de la rupture en Section 3.3 (cf. [BBDTV10]). On présente ensuite, à la Section 3.4, l'utilisation de ces développements asymptotiques pour calculer numériquement la solution de ces problèmes : il suffit de calculer la solution du problème non perturbé et des profils (solutions d'un problème extérieur) pour construire une approximation adéquate de la solution du problème perturbé. Nous avons réalisé des simulations numériques pour l'équation de Laplace et le problème de l'élasticité linéaire (cf. [BDTV09, BBDTV10]). Nous détaillons également l'approximation numérique des profils en proposant des conditions artificielles. Nous verrons que ceci nous a conduits à étudier des problèmes de type Ventcel dégénérés (cf. [BDHV10]).

3.2 Développement asymptotique pour l'équation de Laplace

3.2.1 Cas d'une inclusion

Le cas d'une seule inclusion ω à l'intérieur du domaine Ω_0 ou sur le bord $\partial\Omega_0$ est bien connu maintenant (cf. [MNP00a, II92, DV05, DV07]). Commençons par rappeler certains résultats qui nous seront utiles par la suite et expliquons formellement l'obtention du développement asymptotique. On considère un domaine fixé Ω_0 de $\mathbb{R}^2$ et contenant 0 ainsi qu'un autre domaine ω centré en l'origine 0. Pour tout ε suffisamment petit, on définit le domaine perturbé Ω_ε , représenté à la Figure 3.1, par

$$\Omega_\varepsilon = \Omega_0 \setminus \omega_\varepsilon \quad \text{avec} \quad \omega_\varepsilon = \varepsilon\omega.$$

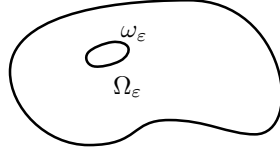


FIGURE 3.1 – Une petite inclusion intérieure.

On s'intéresse au problème suivant

$$\begin{cases} -\Delta u_\varepsilon = f & \text{sur } \Omega_\varepsilon, \\ u_\varepsilon = 0 & \text{sur } \partial\Omega_0, \\ \partial_{\mathbf{n}} u_\varepsilon = 0 & \text{sur } \partial\omega_\varepsilon, \end{cases} \quad (3.2.1)$$

en supposant, pour la présentation, que le support de $f \in L^2(\Omega_0)$ ne contient pas l'origine 0.

On note u_0 la solution de l'équation de Laplace-Dirichlet sur Ω_0 , c'est-à-dire du problème non perturbé :

$$\begin{cases} -\Delta u_0 = f & \text{sur } \Omega_0, \\ u_0 = 0 & \text{sur } \partial\Omega_0. \end{cases} \quad (3.2.2)$$

On sait estimer l'écart $r_\varepsilon^0 := u_\varepsilon - u_0$ entre la solution du problème non perturbé et celle du problème perturbé. On montre ainsi que u_0 est une approximation de u_ε au premier ordre. Expliquons formellement comment déterminer les termes suivants du développement asymptotique de u_ε . Pour déterminer le second terme, on remarque que le reste r_ε^0 vérifie :

$$\begin{cases} -\Delta r_\varepsilon^0 = 0 & \text{sur } \Omega_\varepsilon, \\ r_\varepsilon^0 = 0 & \text{sur } \partial\Omega_0, \\ \partial_{\mathbf{n}} r_\varepsilon^0 = -\partial_{\mathbf{n}} u_0 & \text{sur } \partial\omega_\varepsilon, \end{cases}$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal unité entrant de ω . Pour calculer le terme suivant du développement, nous devons relever la condition de Neumann sur $\partial\omega_\varepsilon$. Au premier ordre, on approche $\partial_{\mathbf{n}} u_0$ sur $\partial\omega_\varepsilon$ par son développement de Taylor en 0 et on relève alors la condition $\partial_{\mathbf{n}} r_\varepsilon^0 = -\nabla u_0(0) \cdot \mathbf{n}$ sur $\partial\omega_\varepsilon$. Les techniques utilisées ici reposent sur la notion de *profil*, solution normalisée de l'équation de Laplace en domaine extérieur obtenu par *blow-up* de la perturbation. Rappelons maintenant un résultat classique concernant l'existence et le comportement des profils (cf. [AGG97]) :

Proposition 3.2.1. *Soit ω un domaine régulier et borné de $\mathbb{R}^2$ tel que $0 \in \omega$. On suppose que la donnée $g \in H^{-1/2}(\partial\omega)$ satisfait $\langle g, 1 \rangle_{H^{-1/2} \times H^{1/2}} = 0$. Alors le problème*

$$\begin{cases} -\Delta V = 0 & \text{sur } \mathbb{R}^2 \setminus \bar{\omega}, \\ \partial_{\mathbf{n}} V = g & \text{sur } \partial\omega, \\ V \rightarrow 0 & \text{à l'infini,} \end{cases} \quad (3.2.3)$$

admet une unique solution faible V_0 dans l'espace variationnel

$$\left\{ V ; \nabla V \in L^2(\mathbb{R}^2 \setminus \bar{\omega}) \quad \text{et} \quad \frac{V}{(1 + |X|) \log(2 + |X|)} \in L^2(\mathbb{R}^2 \setminus \bar{\omega}) \right\}.$$

De plus, cette solution admet la décomposition

$$V_0(X) = \sum_{k=1}^n V_{0,k}(X) + \mathcal{O}_\infty(|X|^{-n+1}), \quad (3.2.4)$$

3.2 Développement asymptotique pour l'équation de Laplace

où $V_{0,k}$ est une fonction harmonique homogène d'ordre $-k$ et $V_{0,k} \in \mathcal{O}_\infty(|X|^{-k})$, au sens où $V_{0,k} \in L^2(\mathbb{R}^2 \setminus \bar{\omega})$ et pour tout multi-indice $i \in \mathbb{N}^2$, il existe une constante positive $C_{i,k}$ telle que

$$|X|^{k+|i|} |\partial^i V_{0,k}(X)| \leq C_{i,k}, \quad \forall X \in \mathbb{R}^2 \setminus \bar{\omega}.$$

Le profil V_0 défini par (3.2.3) avec $g = -\nabla u_0(0) \cdot \mathbf{n}$, mis à l'échelle rapide, est utilisé pour décrire le comportement local de la solution du problème perturbé. On peut établir la convergence du développement asymptotique à l'aide de la décroissance du profil à l'infini. Ainsi, le début du développement asymptotique de u_ε s'écrit

$$u_\varepsilon(x) = u_0(x) + \varepsilon V_0\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) + r_\varepsilon^1(x) \quad \text{avec} \quad \|r_\varepsilon^1\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)} = \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (3.2.5)$$

Le terme en ε^2 s'obtient en regardant le système vérifié par r_ε^1 :

$$\begin{cases} -\Delta r_\varepsilon^1 &= 0 & \text{sur } \Omega_\varepsilon, \\ r_\varepsilon^1 &= -\varepsilon V_0\left(\frac{\cdot}{\varepsilon}\right) & \text{sur } \partial\Omega_0, \\ \partial_{\mathbf{n}} r_\varepsilon^1 &= \psi_\varepsilon^0 & \text{sur } \partial\omega_\varepsilon, \end{cases}$$

où ψ_ε^0 provient du développement de Taylor en 0 de $\partial_{\mathbf{n}} u_0$. Il faut maintenant relever deux termes : l'un en variable lente pour satisfaire la condition de Dirichlet sur $\partial\Omega_0$, l'autre en variable rapide pour satisfaire la condition de Neumann sur l'inclusion. Le problème modèle décrivant le premier relèvement s'écrit :

$$\begin{cases} -\Delta w_1 &= 0 & \text{sur } \Omega_0, \\ w_1 &= \varphi_1 & \text{sur } \partial\Omega_0, \end{cases}$$

où φ_1 se déduit du comportement de V_0 . En ce qui concerne le terme en variable rapide, on est dans le cadre de la Proposition 3.2.1 avec une fonction g qui provient du développement de Taylor de u_0 et de la trace de w_1 . Nous obtenons ainsi, pas à pas, un développement asymptotique complet de u_ε :

Proposition 3.2.2. *Pour tout $N \in \mathbb{N}$, la solution u_ε de (3.2.1) s'écrit*

$$u_\varepsilon(x) = u_0(x) + \sum_{i=0}^N \varepsilon^{i+1} V_i\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) + \sum_{i=1}^N \varepsilon^{i+1} w_i(x) + \mathcal{O}_{H^1(\Omega_\varepsilon)}(\varepsilon^{N+1}).$$

Dans ce développement,

- les profils V_i , en variable rapide, compensent la trace sur l'inclusion du i^{e} terme du développement de Taylor de u_0 et la trace de w_j pour $j \leq i$,
- les profils w_i , en variable lente, compensent la trace de V_j pour $j < i$ sur $\partial\Omega_0$.

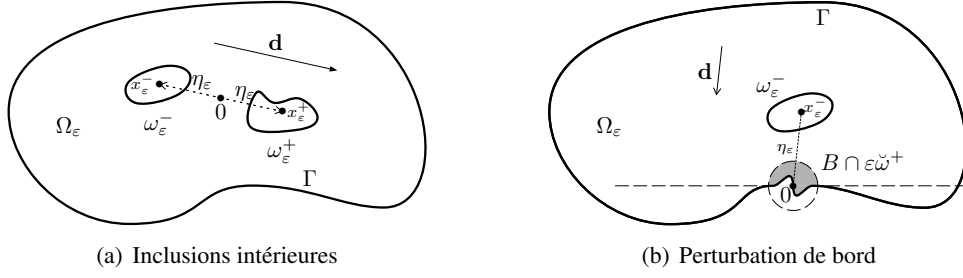
Remarque 3.2.3. *Lorsque l'inclusion est localisée sur le bord et que celui-ci est courbe au voisinage de la perturbation, l'analyse est plus délicate comme le montrent les résultats de [DV05, DV07].*

3.2.2 Cas de deux inclusions

Nous allons maintenant décrire les résultats de [BDTV09] concernant le cas de deux inclusions dont l'une est intérieure et l'autre est soit intérieure, soit sur le bord du domaine. Ces deux géométries sont représentées à la Figure 3.2. Nous expliquerons la démarche dans le premier cas et énoncerons très rapidement les résultats dans la seconde configuration.

On considère pour l'instant le cas de deux inclusions distinctes à l'intérieur du domaine Ω_0 . Soient ω^- et ω^+ deux domaines bornés de $\mathbb{R}^2$ contenant chacun l'origine 0. Pour $\varepsilon > 0$, suffisamment petit, on définit le domaine perturbé Ω_ε de la manière suivante

$$\Omega_\varepsilon = \Omega_0 \setminus \overline{(\omega_\varepsilon^- \cup \omega_\varepsilon^+)} \quad \text{avec} \quad \omega_\varepsilon^\pm = x_\varepsilon^\pm + \varepsilon \omega^\pm, \quad (3.2.6)$$


 FIGURE 3.2 – Deux inclusions de taille ε , à distance $2\eta_\varepsilon$.

où $x_\varepsilon^\pm = \pm \eta_\varepsilon \mathbf{d}$, $\mathbf{d}$ étant un vecteur unité fixé et η_ε un réel. Plus simplement, Ω_ε consiste en le domaine Ω_0 auquel on a retiré deux inclusions dilatées à l'échelle ε et distantes de $2\eta_\varepsilon$, cf. Figure 3.2(a).

Notre but a été de construire un développement asymptotique complet de la solution u_ε du problème de Laplace dans Ω_ε

$$\begin{cases} -\Delta u_\varepsilon = f & \text{sur } \Omega_\varepsilon, \\ u_\varepsilon = 0 & \text{sur } \partial\Omega_0, \\ \partial_{\mathbf{n}} u_\varepsilon = 0 & \text{sur } \partial\omega_\varepsilon^\pm. \end{cases} \quad (3.2.7)$$

Nous supposons à nouveau que le support de la fonction f ne contient pas l'origine 0.

Les résultats obtenus dans le cas d'une inclusion unique peuvent facilement s'étendre au cas de deux inclusions (ou d'un nombre fini) dans les deux situations suivantes :

- *Les inclusions sont à distance $\mathcal{O}(1)$.* Cela correspond à choisir $\eta_\varepsilon = \eta$ indépendant de ε . Dans ce cas, les centres des inclusions $x^\pm$ sont indépendantes de ε . Les profils $V_0^\pm$ sont décroissants, harmoniques sur $\mathbb{R}^2 \setminus \overline{\omega^\pm}$ et satisfont les conditions au bord

$$\partial_{\mathbf{n}} V_0^\pm = -\nabla u_0(x^\pm) \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial\omega^\pm.$$

Au premier ordre, les inclusions n'interagissent pas, leurs contributions dans l'approximation de u_ε sont simplement ajoutées :

$$u_\varepsilon(x) = u_0(x) + \varepsilon \left[V_0^+ \left(\frac{x-x^+}{\varepsilon} \right) + V_0^- \left(\frac{x-x^-}{\varepsilon} \right) \right] + r_\varepsilon^1(x) \quad \text{avec} \quad \|r_\varepsilon^1\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)} = \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (3.2.8)$$

- *Les inclusions sont à distance $\mathcal{O}(\varepsilon)$.* Cela correspond à choisir $\eta_\varepsilon = c\varepsilon$ où c est une constante strictement positive. Dans ce cas, les deux inclusions forment un unique motif à l'échelle ε . On ramène alors le problème à celui d'une seule inclusion $\omega = \omega^+ \cup \omega^-$, auto-similaire par rapport à l'origine 0. Le développement asymptotique de u_ε s'écrit alors

$$u_\varepsilon(x) = u_0(x) + \varepsilon W_0 \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) + r_\varepsilon^1(x) \quad \text{avec} \quad \|r_\varepsilon^1\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)} = \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (3.2.9)$$

où W_0 est le profil associé au motif ω .

On voit que les comportements sont très différents pour ces deux situations : aucune interaction ou interaction totale. On s'est intéressé (cf. [BDTV09] pour les détails et démonstrations des résultats) au cas intermédiaire, où les inclusions sont *modérément proches*, comme l'illustre la Figure 3.2(a) : la distance entre les deux inclusions vaut ε^α avec $\alpha \in (0, 1)$. Le cas limite $\alpha = 0$ correspond à des inclusions distantes de $\mathcal{O}(1)$ et le cas limite $\alpha = 1$ correspond à des inclusions distantes de $\mathcal{O}(\varepsilon)$. Pour construire le développement asymptotique, nous procédons comme pour le cas d'une seule inclusion. On remarque que le reste $r_\varepsilon^0 := u_\varepsilon - u_0$ vérifie le système :

$$\begin{cases} -\Delta r_\varepsilon^0 = 0 & \text{sur } \Omega_\varepsilon, \\ r_\varepsilon^0 = 0 & \text{sur } \partial\Omega_0, \\ \partial_{\mathbf{n}} r_\varepsilon^0 = -\partial_{\mathbf{n}} u_0 & \text{sur } \partial\omega_\varepsilon^+ \cup \partial\omega_\varepsilon^-. \end{cases} \quad (3.2.10)$$

3.2 Développement asymptotique pour l'équation de Laplace

On introduit alors les deux *profils* $V_0^\pm$ définis par (3.2.3) pour chacune des inclusions $\omega = \omega^\pm$. On écrit alors u_ε sous la forme :

$$u_\varepsilon(x) = u_0(x) + \varepsilon \left[V_0^- \left(\frac{x-x_\varepsilon^-}{\varepsilon} \right) + V_0^+ \left(\frac{x-x_\varepsilon^+}{\varepsilon} \right) \right] + r_\varepsilon^1(x).$$

Le second reste r_ε^1 vérifie

$$\begin{cases} -\Delta r_\varepsilon^1 = 0 & \text{sur } \Omega_\varepsilon, \\ r_\varepsilon^1(x) = -\varepsilon \left[V_0^- \left(\frac{x-x_\varepsilon^-}{\varepsilon} \right) + V_0^+ \left(\frac{x-x_\varepsilon^+}{\varepsilon} \right) \right] & \text{pour } x \in \partial\Omega_0, \\ \partial_{\mathbf{n}} r_\varepsilon^1(x) = \mathbf{n} \cdot \nabla u_0(0) - \mathbf{n} \cdot \nabla u_0(x) - \mathbf{n} \cdot \nabla V_0^- \left(\frac{x-x_\varepsilon^-}{\varepsilon} \right) & \text{pour } x \in \partial\omega_\varepsilon^+, \\ \partial_{\mathbf{n}} r_\varepsilon^1(x) = \mathbf{n} \cdot \nabla u_0(0) - \mathbf{n} \cdot \nabla u_0(x) - \mathbf{n} \cdot \nabla V_0^+ \left(\frac{x-x_\varepsilon^+}{\varepsilon} \right) & \text{pour } x \in \partial\omega_\varepsilon^-. \end{cases} \quad (3.2.11)$$

Pour déterminer l'ordre de r_ε^1 , nous avons besoin d'informations supplémentaires sur le comportement de sa trace sur les bords de Ω_ε . Grâce à la Proposition 3.2.1, on connaît le comportement de $V_0^\pm$. Par conséquent,

- quand $x \in \partial\Omega_0$, $|x - x_\varepsilon^\pm|$ a un développement en puissance de ε^α et il existe des coefficients $f_{j,k}$ tels que

$$r_\varepsilon^1(x) = \sum_{\substack{j \geq 1, k \geq 0, \\ j+\alpha k \leq N}} \varepsilon^{j+\alpha k} f_{j,k}(x) + o(\varepsilon^N), \quad \forall x \in \partial\Omega_0. \quad (3.2.12)$$

- quand $x = \pm \varepsilon^\alpha \mathbf{d} + \varepsilon X \in \partial\omega_\varepsilon^\pm$, $|x - x_\varepsilon^\pm| = 2\varepsilon^\alpha |\mathbf{d}| + \varepsilon^{1-\alpha} X$ admet un développement en puissance de $\varepsilon^{1-\alpha}$ et on déduit alors

$$\partial_{\mathbf{n}} r_\varepsilon^1(x) = \sum_{\substack{j \geq 0, k \geq 0, \\ 0 < j+\alpha k \leq N}} \varepsilon^{j+\alpha k} g_{j,k}^\pm(X) + \sum_{2 \leq j \leq \frac{N}{1-\alpha}} \varepsilon^{j(1-\alpha)} h_j^\mp(X) + o(\varepsilon^N), \quad (3.2.13)$$

où les fonctions $g_{j,k}^\pm$ proviennent du développement de Taylor de u_0 et $h_j^\mp$ de la trace des profils $V_0^\mp$. Ces fonctions vérifient les conditions de compatibilité suivantes qui vont permettre le relèvement :

$$\int_{\partial\omega^\pm} g_{j,k}^\pm(X) d\sigma_X = 0 \quad \text{et} \quad \int_{\partial\omega^\pm} h_j^\mp(X) d\sigma_X = 0. \quad (3.2.14)$$

Remarquons que l'on fait un développement à l'ordre N en (3.2.12) et (3.2.13) afin de construire un développement de u_ε à un ordre suffisamment. À ce stade, nous devons alors relever chaque condition de bord apparaissant dans (3.2.12) et (3.2.13). Les fonctions $f_{j,k}$ introduites en (3.2.12) génèrent des correcteurs $F_{j,k}$ définis par

$$\begin{cases} -\Delta F_{j,k} = 0 & \text{sur } \Omega_0, \\ F_{j,k} = -f_{j,k} & \text{sur } \partial\Omega_0. \end{cases} \quad (3.2.15)$$

Ces correcteurs ne satisfont pas les conditions de Neumann sur le bord des inclusions $\partial\omega_\varepsilon^\pm$ et engendrent alors des erreurs sur ces bords. Les fonctions $g_{j,k}^\pm$ et $h_j^\mp$ génèrent des profils $G_{j,k}^\pm$ et $H_j^\mp$ qui ont le même comportement que les premiers correcteurs $V_0^\pm$. Ces profils vérifient :

$$\begin{cases} -\Delta G_{j,k}^\pm = 0 & \text{sur } \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\omega^\pm}, \\ \partial_{\mathbf{n}} G_{j,k}^\pm = -g_{j,k}^\pm & \text{sur } \partial\omega^\pm, \\ G_{j,k}^\pm \rightarrow 0 & \text{à l'infini,} \end{cases} \quad \begin{cases} -\Delta H_j^\mp = 0 & \text{sur } \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\omega^\pm}, \\ \partial_{\mathbf{n}} H_j^\mp = -h_j^\mp & \text{sur } \partial\omega^\pm, \\ H_j^\mp \rightarrow 0 & \text{à l'infini.} \end{cases} \quad (3.2.16)$$

On peut alors exprimer le terme suivant du développement asymptotique de u_ε , puis itérer le procédé afin d'établir le théorème :

Théorème 3.2.4. *La solution u_ε du problème (3.2.7) admet un développement à tout ordre N de la forme*

$$u_\varepsilon(x) = u_0(x) + \varepsilon \left[V_0^- \left(\frac{x-x_\varepsilon^-}{\varepsilon} \right) + V_0^+ \left(\frac{x-x_\varepsilon^+}{\varepsilon} \right) \right] \\ + \sum_{(p,q) \in \mathcal{K}_N} \varepsilon^{p+\alpha q} \left(v_{p+\alpha q}(x) + \varepsilon \left[V_{p+\alpha q}^- \left(\frac{x-x_\varepsilon^-}{\varepsilon} \right) + V_{p+\alpha q}^+ \left(\frac{x-x_\varepsilon^+}{\varepsilon} \right) \right] \right) + r_\varepsilon^N(x),$$

avec $\mathcal{K}_N = \{(p, q) \in \mathbb{Z}^2 \mid p \geq 0, q \geq -\frac{3}{2}p + 1, q \geq -p, p + \alpha q \leq N\}$ et $\|r_\varepsilon^N\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)} = \mathcal{O}(\varepsilon^N)$.

Les termes $v_{p+\alpha q}$, $V_{p+\alpha q}^\pm$ se construisent de façon inductive comme expliqué précédemment.

Remarque 3.2.5. *Si on ne prend en compte que les premiers profils $V_0^\pm$, on a le développement*

$$u_\varepsilon(x) = u_0(x) + \varepsilon \left[V_0^- \left(\frac{x-x_\varepsilon^-}{\varepsilon} \right) + V_0^+ \left(\frac{x-x_\varepsilon^+}{\varepsilon} \right) \right] + r_\varepsilon^1(x),$$

avec $\|r_\varepsilon^1\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)} = \mathcal{O}(\varepsilon^{\min(1+\alpha, 3-2\alpha)})$. (3.2.17)

On peut interpréter ce développement (3.2.17) de la manière suivante : la contribution principale des deux inclusions est la simple superposition de leurs effets individuels. Le reste r_ε^1 contient des informations sur l'influence à un ordre supérieur. Si l'on regarde la structure du reste, on peut distinguer plusieurs situations :

- pour $\alpha < 2/3$, les inclusions sont modérément éloignées l'une de l'autre. Le terme principal du reste r_ε^1 est en $\mathcal{O}(\varepsilon^{1+\alpha})$ et provient du développement de Taylor de u_0 à l'origine 0 ;
- pour $2/3 < \alpha < 1$, les inclusions sont plus proches. Le reste r_ε^1 est en $\mathcal{O}(\varepsilon^{3-2\alpha})$ et rend principalement compte de l'interaction entre les profils V_0^- et V_0^+ ;
- pour $\alpha = 2/3$, les deux contributions sont d'ordre équivalent.

En outre, on note que le reste de (3.2.17) est d'ordre ε lorsque $\alpha \rightarrow 0$ ou $\alpha \rightarrow 1$ car les profils utilisés dans ce développement ne sont pas adaptés à la géométrie limite.

Pour terminer cette partie, mentionnons que les résultats que nous avons obtenus lorsqu'une perturbation se situe sur le bord du domaine comme illustré à la Figure 3.2(b). On suppose cette fois que $0 \in \Omega_0$. Définissons dans ce cas le domaine perturbé Ω_ε :

$$\Omega_\varepsilon = [\Omega_0 \setminus (\overline{\omega_\varepsilon^-} \cup B)] \cup (B \cap \varepsilon \tilde{\omega}^+), \quad (3.2.18)$$

où B est une petite boule fixe centrée en 0 et $\tilde{\omega}^+$ la perturbation du demi-plan en ce sens que $\partial \tilde{\omega}^+$ est composé de trois parties : deux demi-droites horizontales reliées par une courbe rectifiable et Lipschitzienne (cf. Figure 3.3).

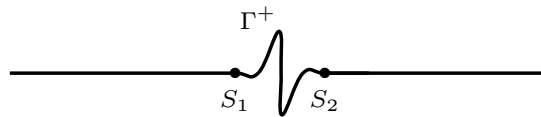


FIGURE 3.3 – Perturbation du demi-plan.

Comme l'expliquent [DV07, TVD06, DTV10], l'inclusion $\Omega_\varepsilon \subset \Omega_0$ n'est pas toujours satisfaite et nous devons étendre le domaine de définition de u_0 à Ω_ε . On peut établir le théorème suivant :

3.3 Extension à l'élasticité linéaire

Théorème 3.2.6. *La solution u_ε de*

$$\begin{cases} -\Delta u_\varepsilon &= f & \text{sur } \Omega_\varepsilon, \\ u_\varepsilon &= 0 & \text{sur } \partial\Omega_\varepsilon \setminus \partial\omega_\varepsilon^-, \\ \partial_{\mathbf{n}} u_\varepsilon &= 0 & \text{sur } \partial\omega_\varepsilon^-, \end{cases} \quad (3.2.19)$$

admet un développement à tout ordre N

$$\begin{aligned} u_\varepsilon(x) &= \zeta(|\frac{x}{\varepsilon}|) \tilde{u}_0(x) + \varepsilon \left[V_0^-\left(\frac{x-x_\varepsilon^-}{\varepsilon}\right) + \chi(|x|) V_0^+\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \right] \\ &+ \sum_{(p,q) \in \mathcal{K}_N} \varepsilon^{p+\alpha q} \left(\zeta(|\frac{x}{\varepsilon}|) v_{p+\alpha q}(x) + \varepsilon \left[V_{p+\alpha q}^-\left(\frac{x-x_\varepsilon^-}{\varepsilon}\right) + \chi(|x|) V_{p+\alpha q}^+\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \right] \right) + r_\varepsilon^N(x), \end{aligned}$$

avec $\mathcal{K}_N$ défini au Théorème 3.2.4 et $\|r_\varepsilon^N\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)} = \mathcal{O}(\varepsilon^N)$. La fonction $\tilde{u}_0$ est construite à partir du développement de Taylor de u_0 et la fonction de troncature χ est à support au voisinage de l'inclusion. La fonction de troncature χ permet de définir le profil $V_{p+\alpha q}^+$ sur Ω_ε . La fonction de troncature ζ permet d'assurer que les termes du développement asymptotique sont dans $H^1(\Omega_\varepsilon)$.

Remarque 3.2.7. *Dans [BDTV09], nous avons énoncé les résultats pour des problèmes posés en dimension 2 avec conditions homogènes de Neumann sur $\partial\omega_\varepsilon^\pm$ (ou Dirichlet pour une perturbation de bord) mais on peut généraliser à d'autres conditions. En particulier, ces résultats s'étendent facilement aux problèmes avec conditions de Neumann en dimension $d \geq 2$ et conditions de Dirichlet en dimension $d \geq 3$. Le problème de Dirichlet en dimension 2 est beaucoup plus délicat à cause du potentiel logarithmique croissant.*

3.3 Extension à l'élasticité linéaire

Dans cette partie, nous mentionnons les résultats asymptotiques pour les équations de l'élasticité linéaire. Le schéma utilisé pour le Laplacien reste valable pour les équations de Navier. Nous utilisons cette analyse dans le cadre de la mécanique numérique pour étudier le comportement à rupture de structures élastiques avec de petites inhomogénéités. Notre but est de dégager une stratégie numérique avec une discrétisation grossière du domaine non perturbé afin d'analyser la réponse d'un matériau de la phase élastique à la rupture. Pour cela, on considère deux modèles macroscopiques décrivant chacun une des phases du comportement :

- l'analyse asymptotique permet d'évaluer l'influence de la présence de micro-défauts sur la solution,
- un modèle à discontinuité forte permet de prendre en compte, à l'échelle de la structure, des zones de localisation de contraintes et d'apparition de la fissuration.

Je présente ici les résultats pour la première phase. La deuxième phase est étudiée dans [BDVV06, BDVV08, BBDTV10].

On détermine l'influence des perturbations géométriques en utilisant comme précédemment une analyse asymptotique multi-échelle des équations de l'élasticité linéaire. On suppose que les inclusions sont localisées sur le bord du domaine.

On considère un domaine Ω_0 de $\mathbb{R}^2$ tel que le bord coïncide avec l'axe des abscisses sur un petit voisinage de l'origine 0. L'article [BDVV08] avait traité le cas d'une seule inclusion. Nous avons étudié dans [BBDTV10] le cas de deux inclusions modérément proches. Nous considérons un domaine Ω_ε auquel on a retiré deux inclusions de taille ε près de 0 :

$$\Omega_\varepsilon = \Omega_0 \setminus \overline{\omega_\varepsilon^1 \cup \omega_\varepsilon^2} \quad \text{avec} \quad \omega_\varepsilon^j = x_\varepsilon^j + \varepsilon \omega^j, \quad x_\varepsilon^1 = \varepsilon^\alpha \mathbf{d} \quad \text{et} \quad x_\varepsilon^2 = -\varepsilon^\alpha \mathbf{d}, \quad \alpha \in (0, 1).$$

3 Analyse multi-échelle et numérique de problèmes elliptiques perturbés

On suppose que $0 \in \omega^j$ et que $\mathbf{d}$ est le vecteur tangent unitaire au bord en 0. On note $\mathbf{H}_\infty^j$ les domaines non bornés obtenus par blow-up autour de chaque perturbation :

$$\mathbf{H}_\infty^j = \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \setminus \overline{\omega^j}.$$

Le problème qui nous intéresse s'écrit :

$$\begin{cases} -\mu \Delta \mathbf{u}_\varepsilon - (\lambda + \mu) \nabla \operatorname{div} \mathbf{u}_\varepsilon &= \mathbf{0} & \text{sur } \Omega_\varepsilon, \\ \mathbf{u}_\varepsilon &= \mathbf{u}^d & \text{sur } \Gamma_d, \\ \sigma(\mathbf{u}_\varepsilon) \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{g} & \text{sur } \Gamma_n, \end{cases} \quad (3.3.1)$$

où Γ_d et Γ_n représentent les parties du bord où l'on impose respectivement des conditions de Dirichlet et Neumann. Le bord Γ_n inclut le bord de la perturbation et on suppose que $\mathbf{g}$ s'annule au voisinage de la perturbation. Dans l'équation précédente, $\mathbf{u}_\varepsilon$ représente le déplacement et σ le tenseur des contraintes :

$$\sigma_{ij}(\mathbf{u}) = \lambda(\partial_1 \mathbf{u}_1 + \partial_2 \mathbf{u}_2) \delta_{ij} + \mu(\partial_i \mathbf{u}_j + \partial_j \mathbf{u}_i).$$

La solution de (3.3.1) s'écrit au premier ordre :

$$\mathbf{u}_\varepsilon(x) = \mathbf{u}_0(x) - \varepsilon \sum_{j=1}^2 \left[\alpha_1^j \mathbf{v}_1^j \left(\frac{x-x_\varepsilon^j}{\varepsilon} \right) + \alpha_2^j \mathbf{v}_2^j \left(\frac{x-x_\varepsilon^j}{\varepsilon} \right) \right] + \mathcal{O} \left(\varepsilon^{\min(1+\alpha, 3-2\alpha)} \right), \quad (3.3.2)$$

avec $\mathbf{u}_0$ la solution sur le domaine non perturbé, $\alpha_1 = \sigma_{11}(\mathbf{u}_0)(\mathbf{0})$ et $\alpha_2 = \sigma_{12}(\mathbf{u}_0)(\mathbf{0})$. Les profils $\mathbf{v}_1^j$ et $\mathbf{v}_2^j$ sont obtenus comme solution de l'équation de Navier homogène sur le domaine non borné $\mathbf{H}_\infty^j$ avec conditions de Neumann sur le bord de la perturbation mise à l'échelle unité :

$$\begin{cases} -\mu \Delta \mathbf{v}_\ell^j - (\lambda + \mu) \nabla \operatorname{div} \mathbf{v}_\ell^j &= \mathbf{0} & \text{sur } \mathbf{H}_\infty^j, \\ \sigma(\mathbf{v}_\ell^j) \cdot \mathbf{n}^j &= \mathbf{G}_\ell^j & \text{sur } \partial \mathbf{H}_\infty^j, \\ \mathbf{v}_\ell^j &\rightarrow \mathbf{0} & \text{à l'infini,} \end{cases} \quad (3.3.3)$$

avec $\mathbf{G}_1^j = (\mathbf{n}_1^j, 0)$, $\mathbf{G}_2^j = (0, \mathbf{n}_1^j)$ et $\mathbf{n}_1^j$ la première composante de la normale unitaire extérieure de $\partial \mathbf{H}_\infty^j$.

3.4 Simulations numériques

3.4.1 Méthode de superposition

Le calcul direct de la solution u_ε du problème (3.2.7) (ou de la même manière de (3.3.1)) requiert un maillage très fin si ε est petit (voir les maillages des Figures 3.5 et 3.9(a) pour les calculs de référence). Pour des valeurs de ε très petites, il est naturel d'utiliser le développement asymptotique. Plus précisément, on approche u_ε par son développement au premier ordre

$$u_1(x) = u_0(x) + \varepsilon \left[V_0^- \left(\frac{x-x_\varepsilon^-}{\varepsilon} \right) + V_0^+ \left(\frac{x-x_\varepsilon^+}{\varepsilon} \right) \right]. \quad (3.4.1)$$

Pour calculer une approximation de u_ε , il suffit donc de calculer u_0 et les profils $V_0^\pm$. Tandis que u_0 est la solution d'un problème sur un domaine borné (domaine indépendant de ε et qui peut donc être maillé grossièrement), chaque profil est solution d'un problème posé en domaine extérieur infini. Le calcul des profils dans une géométrie de référence (effectué une fois pour toute et pour chaque forme de défauts) se fait par une méthode d'éléments finis sur un domaine tronqué sur le bord duquel on impose des conditions aux limites artificielles. Nous reviendrons sur le calcul des profils à la section suivante.

3.4 Simulations numériques

Dans le contexte de la mécanique de la fracture, on souhaite prédire le comportement de l'endommagement à la rupture des structures en présence de défauts géométriques dans le matériau. L'asymptotique (3.3.2) est utilisée pour calculer le champ de déplacement sans mailler finement au voisinage des petites inclusions ou des inhomogénéités. La formule de superposition (3.3.2) n'est pas forcément commode pour être implémentée dans un code de calculs éléments finis existant. On peut alors préférer une méthode d'enrichissement cinématique de l'approximation en espace grâce à une partition de l'unité (cf. [CLPRS07, MB96]).

La discrétisation du champ de déplacement est alors de la forme :

$$\mathbf{u}^h(x) = \mathbf{u}_0^h(x) - \varepsilon \sum_{j=1}^2 \sum_{\ell=1}^2 \sum_{i \in \mathcal{J}_j} N^i(x) \left[\alpha_{i\ell,1}^j \tilde{\mathbf{v}}_{\ell,1}^j \left(\frac{x-x_\varepsilon^j}{\varepsilon} \right) + \alpha_{i\ell,2}^j \tilde{\mathbf{v}}_{\ell,2}^j \left(\frac{x-x_\varepsilon^j}{\varepsilon} \right) \right], \quad (3.4.2)$$

où $\mathcal{J}_j$ désigne les indices des nœuds situés dans la zone enrichie relative à la perturbation j , $(N^i)_i$ représentent les fonctions de forme standard associées au nœud i et $\alpha_{i\ell,k}^j$ est le vecteur à deux composantes des degrés de liberté relatifs à la fonction d'enrichissement $\tilde{\mathbf{v}}_{\ell,k}^j$, obtenu comme approximations des profils $\mathbf{v}_\ell^j$. Pour assurer la stabilité du problème à résoudre, on utilise une stratégie maître-esclave comme l'explique l'article [BBDTV10] avec plus de détails.

3.4.2 Calcul des profils

Un profil est défini comme solution d'un problème posé en domaine infini extérieur. Pour le calculer numériquement, nous introduisons un bord artificiel (un cercle de rayon R) et calculons la solution du problème sur ce domaine tronqué en imposant une condition artificielle adaptée afin d'obtenir une bonne approximation du profil. Les résultats numériques que je présente maintenant ont été réalisés avec la librairie d'éléments finis MÉLINA [Ma07].

Équation de Laplace

On commence par s'intéresser au calcul des profils satisfaisant (3.2.3) pour l'équation de Laplace-Dirichlet. Afin de calculer les profils $V_0^\pm$ intervenant dans l'expression (3.4.1), on introduit le *profil vectoriel normalisé* $\mathbf{V} = \mathbf{V}_\omega$, solution du problème

$$\begin{cases} -\Delta \mathbf{V} &= 0 & \text{sur } \mathbb{R}^2 \setminus \omega, \\ \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{V} &= \mathbf{g} & \text{sur } \partial\omega, \\ \mathbf{V} &\rightarrow 0 & \text{à l'infini,} \end{cases}$$

avec $\mathbf{g} = -\mathbf{n}$. On retrouve les profils $V_0^\pm$ à partir $\mathbf{V}_{\omega^\pm}$ grâce à la formule $V_0^\pm = \nabla u_0(0) \cdot \mathbf{V}_{\omega^\pm}$, de sorte que la relation (3.4.1) devienne

$$u_1(x) = u_0(x) + \varepsilon \nabla u_0(0) \cdot \left[\mathbf{V}_{\omega^-} \left(\frac{x-x_\varepsilon^-}{\varepsilon} \right) + \mathbf{V}_{\omega^+} \left(\frac{x-x_\varepsilon^+}{\varepsilon} \right) \right]. \quad (3.4.3)$$

On peut calculer le profil $\mathbf{V}_{\omega^\pm}$ composante par composante comme solution d'un problème aux limites avec conditions aux limites adaptées sur le bord artificiel. Notons V et g la première composante de $\mathbf{V}$ et $\mathbf{g}$, respectivement (on procède de la même manière pour la deuxième composante). Pour déterminer la condition au bord artificiel $|x| = R$, on cherche une combinaison linéaire entre V et ses dérivées normales et tangentielles de sorte que le développement asymptotique en puissance de R à l'infini de cette combinaison commence en R^{-p} pour différentes valeurs de l'ordre p . Pour $p = 0, 1, 2$, on

obtient les conditions de Dirichlet, Robin et Ventcel respectivement :

$$V = 0, \quad (3.4.4)$$

$$V + R\partial_{\mathbf{n}}V = 0, \quad (3.4.5)$$

$$V + \frac{3R}{2}\partial_{\mathbf{n}}V - \frac{R^2}{2}\Delta_{\tau}V = 0. \quad (3.4.6)$$

Numériquement, on résout donc l'un des problèmes

$$\begin{cases} -\Delta V = 0 & \text{sur } B(0, R) \setminus \omega, \\ \partial_{\mathbf{n}}V = g & \text{sur } \partial\omega, \\ (3.4.4) \text{ ou } (3.4.5) \text{ ou } (3.4.6) & \text{sur } \partial B(0, R). \end{cases} \quad (3.4.7)$$

La Figure 3.4 donne la convergence pour ces trois conditions artificielles lorsque R tend vers l'infini

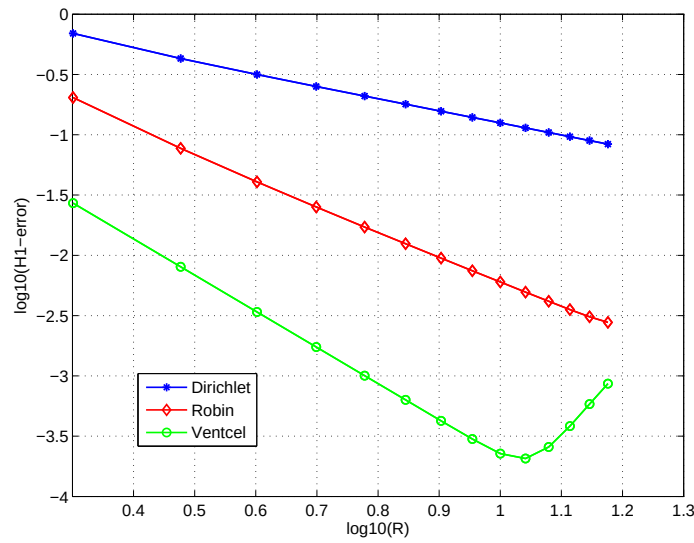


FIGURE 3.4 – Convergence des problèmes approchés (3.4.7) à nombre de degrés de liberté fixé.

dans le cas modèle d'une couronne de rayon interne 1 et externe R en utilisant le même maillage pour chaque condition. On utilise un maillage à 64 éléments carré de degré $\mathbb{Q}_8$ et une interpolation non-isoparamétrique $\mathbb{Q}_{10}$. On compare la solution de (3.4.7) avec un calcul de référence et on observe les pentes de coefficient 1, 2, 3 comme attendu. On remarque que la condition de Ventcel (3.4.6) n'est plus satisfaisante lorsque R devient assez grand ; cela provient d'une approximation peu précise de la dérivée tangentielle (ce qui peut être amélioré en utilisant un maillage plus fin).

Équations de Navier

On s'intéresse maintenant au calcul des profils définis par (3.3.3) pour les équations de Navier. Comme dans le cas de l'équation de Laplace, nous utilisons une condition aux limites approchée sur un bord artificiel afin de calculer précisément les profils. La condition artificielle la plus simple est celle de Dirichlet. En écrivant le comportement à l'infini des profils en coordonnées polaires, on peut déterminer une condition artificielle plus précise (cf. [BDHV11, BBDTV11])

$$\sigma(\mathbf{u})\mathbf{n} + \frac{1}{R} \frac{E}{1+\nu} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1-\nu & 1 \end{bmatrix} \mathbf{u} + \frac{1}{R} \frac{E(1-\nu)}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \Delta_{\tau} \mathbf{u} = 0, \quad (3.4.8)$$

3.4 Simulations numériques

sur le demi-cercle de rayon R , avec $\Delta_\tau = d^2/d\theta^2$. Les paramètres physiques E et ν sont tels que les coefficients devant l'opérateur de Laplace-Beltrami sont positifs car le module de Young E est positif et le coefficient de Poisson ν prend ses valeurs dans l'intervalle $(-1, 0.5)$. Nous avons la relation suivante :

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}.$$

Le problème (3.4.8) est dégénéré et il faut commencer par prouver l'existence d'une solution. Dans [BDHV10], nous avons étudié le cas modèle plus simple de l'équation de Laplace avec condition de Ventcel :

$$\begin{cases} -\Delta u = 0 & \text{sur } \Omega, \\ \partial_n u + \alpha u + \beta \Delta_\tau u = \varphi & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (3.4.9)$$

sous l'hypothèse non usuelle $\beta > 0$. Sous cette condition, la forme quadratique associée n'est plus coercive et on ne peut plus appliquer la théorie variationnelle classique. On reformule le problème aux limites en une équation non locale sur le bord $\partial\Omega$. Pour ce faire, on introduit l'opérateur de Dirichlet à Neumann Λ associé à l'opérateur de Laplace sur Ω : cet opérateur Λ est défini de $H^{1/2}(\partial\Omega)$ sur $H^{-1/2}(\partial\Omega)$ par $\Lambda(\psi) = \partial_n U$ où U est la solution du problème aux limites

$$\begin{cases} -\Delta U = 0 & \text{sur } \Omega, \\ U = \psi & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases}$$

L'emploi de l'opérateur de Dirichlet à Neumann permet de récrire (3.4.9) comme une équation de bord

$$\beta \Delta_\tau w + \Lambda w + \alpha w = \varphi \quad \text{sur } \partial\Omega. \quad (3.4.10)$$

La théorie des opérateurs pseudodifférentiels permet de prouver l'existence et l'unicité de solution hormis dans certains cas déterminés par des relations entre les coefficients. Le problème reste bien posé quand on perturbe légèrement le domaine. On montre alors que le problème (3.4.9) est bien posé lorsque R est suffisamment grand.

Ces résultats constituent un premier pas pour l'étude des conditions de Ventcel pour les équations de l'élasticité linéaire (3.4.8) (cf. [BDHV11, NU95]).

3.4.3 Simulations numériques

Équation de Laplace

Présentons maintenant les simulations numériques pour le problème de Laplace (3.2.7). Pour comparer la solution u_ε et son approximation à l'ordre 0 et 1, nous avons besoin de calculer assez précisément u_ε . La Figure 3.5 donne des exemples de maillages utilisés pour le calcul de référence.

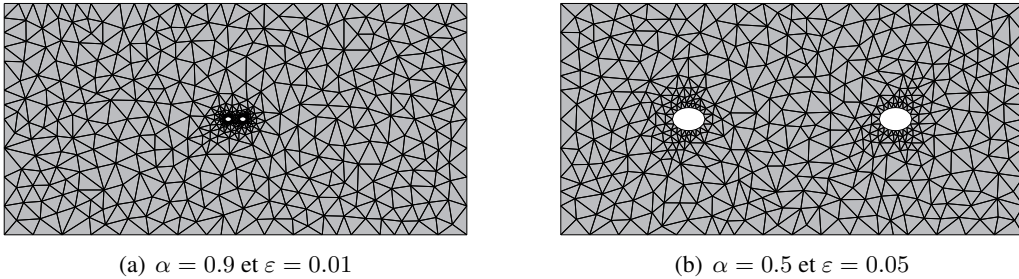


FIGURE 3.5 – Exemple de maillages pour calculer u_ε .

La Figure 3.6 représente les différences $u_\varepsilon - u_0$ et $u_\varepsilon - u_1$ lorsque les perturbations sont deux ellipses. La valeur $\varepsilon = 0.0585$ est assez grande pour des raisons de représentation des solutions, mais on voit toutefois que l'approximation par l'ordre 1, u_1 , est bien meilleure que celle par u_0 . L'erreur principale dans $u_\varepsilon - u_0$ se concentre au voisinage des inclusions et elle est corrigée partiellement dans $u_\varepsilon - u_1$. À la Figure 3.7, on représente les erreurs (en norme $H^1(\Omega_\varepsilon)$) obtenues pour les deux approximations u_0 et u_1 pour deux inclusions elliptiques et $\alpha = 0.2$. Lorsque l'on calcule les taux de convergence locale à la Figure 3.7, on retrouve l'ordre du reste $u_\varepsilon - u_1$ en $1 + \alpha = 1.2$ comme mentionné dans le développement asymptotique (3.2.17).

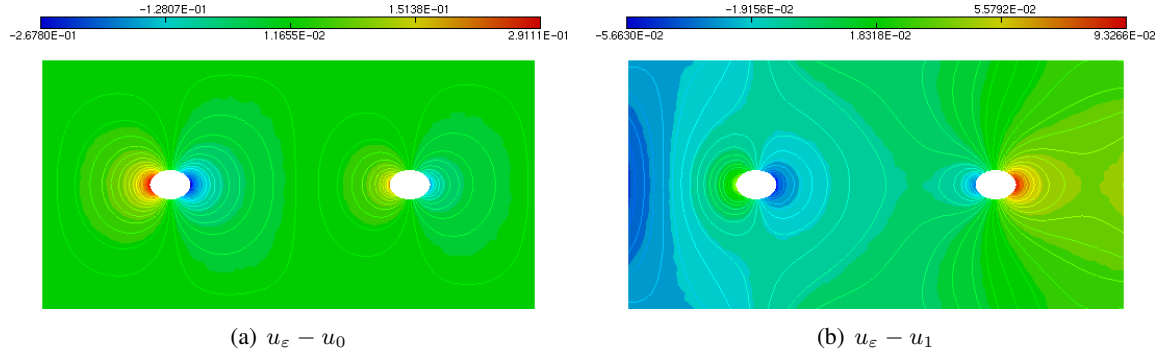


FIGURE 3.6 – $u_\varepsilon - u_0$ et $u_\varepsilon - u_1$ pour $\varepsilon = 0.0585$ et $\alpha = 0.5$.

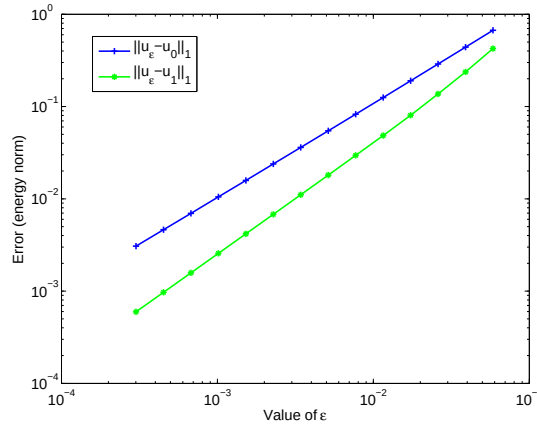


FIGURE 3.7 – Norme d'énergie de $u_\varepsilon - u_0$ et $u_\varepsilon - u_1$ pour $\alpha = 0.2$.

Équation de Navier

Présentons maintenant les résultats numériques pour les équations de Navier. On considère un domaine soumis à un chargement en traction (voir Figure 3.8). Le domaine est percé par deux perturbations : la première, centrée au point $O_1 = (105, 0)$ et de rayon 2 mm et la seconde de rayon 1.5 mm, centrée au point $O_2 = (135, 0)$.

Afin de valider la stratégie d'enrichissement adoptée pour décrire l'influence de petits défauts, nous comparons les résultats obtenus pour calculer le déplacement et les champs de contraintes par les deux approches : un calcul de référence obtenu par une discrétisation fine de la géométrie *réelle* (voir Figure 3.9(a)) par une méthode d'éléments finis standard et la méthode d'enrichissement sur un maillage grossier (voir Figure 3.9(b)) sur le domaine non perturbé.

3.4 Simulations numériques

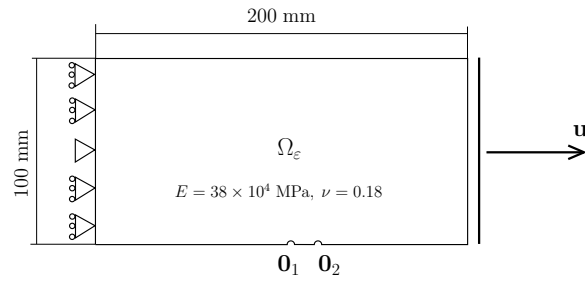


FIGURE 3.8 – Géométrie, chargement et propriétés du matériau.

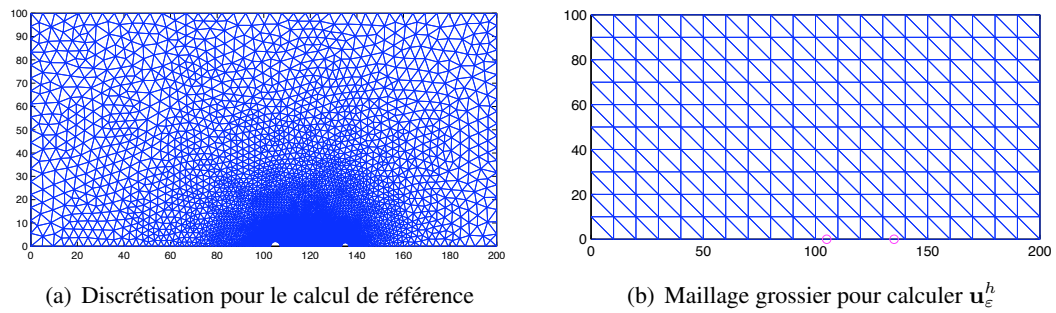


FIGURE 3.9 – Discretisations.

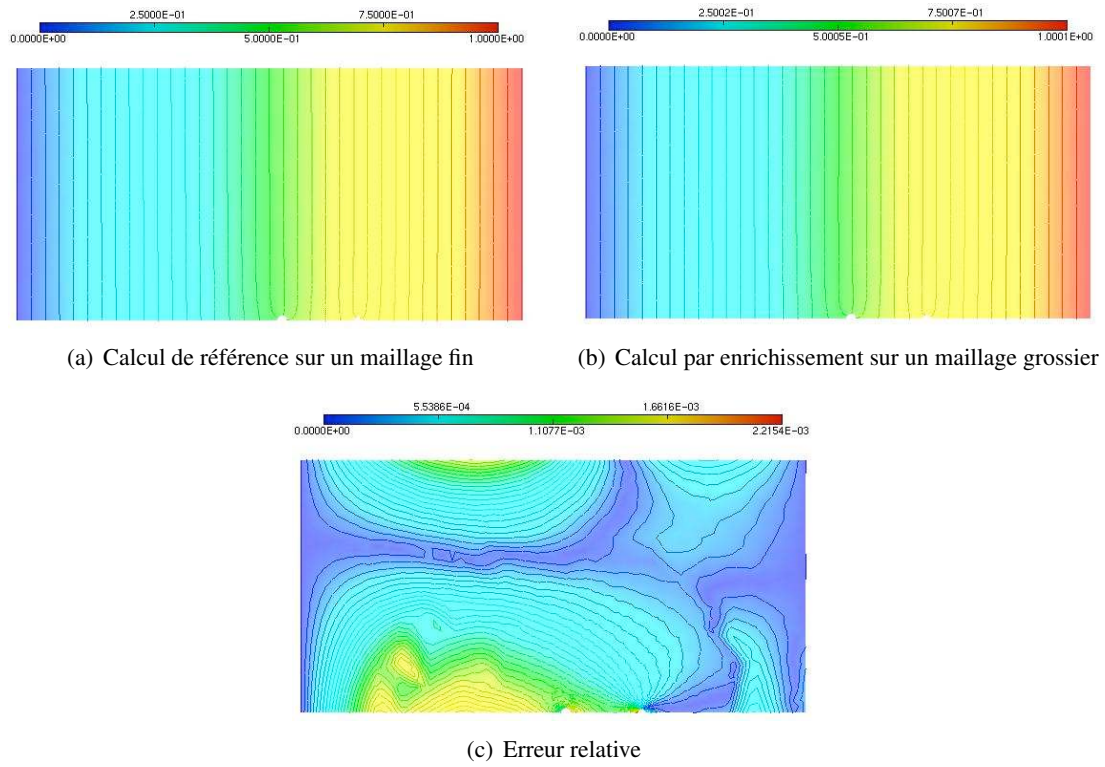


FIGURE 3.10 – Champ de déplacement u_x et carte d'erreur relative.

La Figure 3.10 représente les résultats obtenus pour le champ de déplacement dans la direction de la traction. L'erreur relative entre ces deux calculs est inférieure à 0.25%, ce qui prouve la pertinence de la stratégie proposée.

3.5 Perspectives

On a établi un développement asymptotique complet pour l'équation de Laplace avec conditions de Neumann (ou de Dirichlet en dimension ≥ 3) lorsque la taille des deux inclusions tend plus vite vers zéro que la distance entre elles, c'est-à-dire que les inclusions sont de taille ε à distance ε^α avec $\alpha \in (0, 1)$. La situation $\alpha > 1$, correspondant au cas où les inclusions se rapprochent plus vite que leur distance ne diminue, est plus compliquée car le domaine limite est le complémentaire de deux domaines tangents avec un double cusp. Il s'agit maintenant d'étudier ce modèle.

Dans le cas de conditions de Dirichlet en dimension 2, la solution fondamentale n'est plus décroissante. Cette difficulté modifie la nature du développement car la trace des correcteurs sur le bord en variables rapides n'est plus petite. On pourra commencer par s'intéresser au cas d'inclusions circulaires pour lesquelles le profil est explicite.

Pour calculer les profils dans le cas de l'élasticité linéaire, nous avons proposé des conditions artificielles de type Ventcel en (3.4.8). Nous souhaiterions étendre les résultats obtenus dans [BDHV11] à ce problème vectoriel. Pour cela, on va utiliser la décomposition en symboles de l'opérateur grâce aux travaux de Uhlmann-Nakamura [NU95].

Chapitre 4

Partitions minimales et nodales

Dans ce chapitre, je décris mes travaux en collaboration avec Bernard Helffer, Thomas Hoffmann-Ostenhof, Grégory Vial et plus récemment avec Corentin Léna qui vient de commencer sa thèse sur cette thématique. Les résultats sont détaillés dans les articles [BHV10, BHH09, BH11] et les articles de survey [He10, He11]. De nombreuses simulations numériques sont disponibles à l'adresse

<http://w3.bretagne.ens-cachan.fr/math/simulations/MinimalPartitions/>

L'objet de ce travail est de comprendre le lien entre les partitions nodales et minimales et ainsi de déterminer ces dernières.

4.1 Survol de quelques résultats connus

4.1.1 Partitions minimales

On considère Ω un ouvert borné, régulier ($C^{1,\alpha}$ par morceaux pour un certain $\alpha > 0$) et connexe de $\mathbb{R}^2$. On note pour tout ouvert $D \subset \Omega$,

$$\lambda_1(D) < \lambda_2(D) \leq \dots \leq \lambda_n(D),$$

les valeurs propres du Laplacien $-\Delta$ sur D avec conditions de Dirichlet, répétées selon leur multiplicité.

Définition 4.1.1. On fixe un entier $k \geq 1$. Une **k -partition** est un ensemble d'ouverts connexes et disjoints de Ω tels que

$$\text{Int}(\overline{\cup_i D_i}) \setminus \partial\Omega \subset \Omega.$$

On note $\mathcal{D}_k(\Omega)$ l'ensemble des k -partitions. Pour toute k -partition $\mathcal{D} = (D_i)_{i=1}^k \in \mathcal{D}_k(\Omega)$, on note $\Lambda_k(\mathcal{D})$ la plus grande première valeur propre du Laplacien-Dirichlet sur les sous-domaines D_i :

$$\Lambda_k(\mathcal{D}) := \max_{1 \leq i \leq k} \lambda_1(D_i). \quad (4.1.1)$$

On s'intéresse alors au problème de minimisation de $\Lambda_k(\mathcal{D})$ parmi les k -partitions :

$$\mathfrak{L}_k(\Omega) = \inf\{\Lambda_k(\mathcal{D}), \mathcal{D} \in \mathcal{D}_k\}. \quad (4.1.2)$$

Une k -partition $\mathcal{D} \in \mathcal{D}_k(\Omega)$ vérifiant $\Lambda_k(\mathcal{D}) = \mathfrak{L}_k(\Omega)$ est appelée **k -partition minimale** de Ω . Il est facile de montrer que tous les $\lambda_1(D_i)$ sont égaux lorsque $\mathcal{D} = (D_i)_{1 \leq i \leq k}$ est une k -partition minimale. Définissons la régularité d'une partition.

Définition 4.1.2. Pour tout $\mathcal{D} = (D_i)_{1 \leq i \leq k} \in \mathcal{D}_k(\Omega)$, on note

$$N(\mathcal{D}) = \overline{\cup_i (\partial D_i \cap \Omega)}. \quad (4.1.3)$$

On dit qu'une k -partition $\mathcal{D}$ est **régulière** si elle vérifie les conditions suivantes :

4.1 Survol de quelques résultats connus

1. Il y a un nombre fini de points $x_i \in \Omega \cap N(\mathcal{D})$ tels qu'au voisinage de x_i , $N(\mathcal{D})$ est la réunion d'au moins deux courbes régulières se terminant en x_i . En dehors de ces points, $N(\mathcal{D})$ est localement difféomorphe à une courbe régulière.
2. $\partial\Omega \cap N(\mathcal{D})$ est constitué d'un nombre fini de points z_i au voisinage desquels $N(\mathcal{D})$ est la réunion d'au moins une courbe régulière.
3. $N(\mathcal{D})$ vérifie la propriété d'intersection à angles égaux.

Commençons par énoncer un résultat d'existence des partitions minimales démontré par Conti-Terracini-Verzini [CTV05a] et Helffer-Hoffmann–Ostenhof-Terracini [HHT09] (cf. également [CTV03, CTV05b, BBH98, CL07]).

Proposition 4.1.3. *Pour tout entier k , il existe une k -partition minimale régulière de Ω .*

4.1.2 Partitions nodales

Définition 4.1.4. *Pour toute fonction $u \in C_0^0(\Omega)$, les **ensembles nodaux** de u sont les composantes connexes de $\Omega \setminus N(u)$ où $N(u)$ est l'ensemble des zéros de u :*

$$N(u) = \overline{\{x \in \Omega \mid u(x) = 0\}}.$$

On note $\mu(u)$ le nombre d'ensembles nodaux de u .

Définition 4.1.5. *Soit u_n un vecteur propre du Laplacien-Dirichlet associée à la valeur propre $\lambda_n(\Omega)$. Les ensembles nodaux de u_n forment une $\mu(u_n)$ -partition de Ω que l'on nomme **partition nodale**.*

Les partitions nodales sont des partitions régulières car $N(u_n)$ est une courbe C^∞ sauf en un nombre fini de points critiques. En chaque point critique $x \in \bar{\Omega}$, $N(u_n)$ est localement la réunion de demi-courbes se rejoignant en x à angles égaux. Si x est un point intérieur, alors il y a un nombre pair de courbes se rejoignant en x .

4.1.3 Lien entre partitions minimales et nodales

Intéressons-nous maintenant au cardinal des ensembles nodaux d'une partition nodale. D'après le théorème de Courant, tout vecteur propre réel u_n associé à $\lambda_n(\Omega)$ a au plus n ensembles nodaux et on a donc la majoration

$$\mu(u_n) \leq n.$$

Définition 4.1.6. *On dit que le vecteur propre u_n associé à la valeur propre $\lambda_n(\Omega)$ est **Courant-sharp** lorsque u_n a exactement n ensembles nodaux : $\mu(u_n) = n$.*

À l'inverse, on peut chercher des k -partitions parmi les vecteurs propres.

Définition 4.1.7. *Pour tout entier $k \geq 1$, on note $V_k(\Omega)$ la plus petite valeur propre dont l'espace propre associé contient un vecteur propre u_k ayant k ensembles nodaux. On pose $V_k(\Omega) = +\infty$ s'il n'y a aucun vecteur propre avec k ensembles nodaux.*

Nous pouvons alors encadrer $\mathfrak{L}_k(\Omega)$ (cf. [CTV05a, HHT09]) :

Proposition 4.1.8. *Pour tout entier $k \geq 1$,*

$$\lambda_k(\Omega) \leq \mathfrak{L}_k(\Omega) \leq V_k(\Omega). \quad (4.1.4)$$

Nous obtenons immédiatement des informations dans le cas $k = 1$ et $k = 2$ car tout vecteur propre associé à $\lambda_1(\Omega)$ est de signe constant et que $\lambda_2(\Omega) = V_2(\Omega)$:

Corollaire 4.1.9. 1. $\mathfrak{L}_1(\Omega) = \lambda_1(\Omega)$.

2. Les partitions nodales des vecteurs propres associés à la seconde valeur propre $\lambda_2(\Omega)$ de la réalisation de Dirichlet du Laplacien sur Ω sont des 2-partitions minimales et on a

$$\mathfrak{L}_2(\Omega) = \lambda_2(\Omega).$$

On peut alors se demander si cette situation est générale. Le théorème de Pleijel [Pl56] nous donne une réponse négative de manière asymptotique car les vecteurs propres u_k pour la réalisation de Dirichlet du Laplacien ne sont pas Courant-sharp lorsque k est assez grand. Plus précisément, il existe k_0 tel que $\lambda_k(\Omega) < V_k(\Omega)$ pour tout $k \geq k_0$.

On peut quand même étudier le lien entre les partitions nodales pour u_k et les k -partitions minimales pour $3 \leq k < k_0$. Ceci nous conduit à définir la notion de **partition bipartite**.

Définition 4.1.10. Soit $\mathcal{D} = (D_i)_{1 \leq i \leq k} \in \mathcal{D}_k$. On dit que D_i et D_j sont voisins si $\text{Int}(\overline{D_i \cup D_j}) \setminus \partial\Omega$ est connexe. Pour chaque partition, on définit un graphe en associant à chaque D_i un sommet et à chaque paire $D_i \sim D_j$ une arête. Un graphe est bipartite si on peut le colorier avec deux couleurs (deux sous-domaines voisins séparés par une arête ayant deux couleurs différentes).

Par abus de langage, on dira qu'une partition est *bipartite* lorsque son graphe l'est. La régularité des partitions nodales permet de montrer la proposition suivante.

Proposition 4.1.11. Toute partition nodale est bipartite.

Le théorème suivant, démontré dans [HHT09], donne une condition nécessaire pour qu'une partition minimale soit nodale.

Proposition 4.1.12. Si le graphe d'une partition minimale est bipartite, alors c'est une partition nodale.

On peut alors naturellement se demander si la réciproque est vraie. Pour cela, citons un résultat de [HHT09] précisant le Théorème 4.1.8.

Proposition 4.1.13. Soit $k \geq 1$. Si $\mathfrak{L}_k(\Omega) = V_k(\Omega)$ ou $\mathfrak{L}_k(\Omega) = \lambda_k(\Omega)$, alors

$$\lambda_k(\Omega) = \mathfrak{L}_k(\Omega) = V_k(\Omega).$$

Dans ce cas, il existe un vecteur propre Courant-sharp associé à $\lambda_k(\Omega)$.

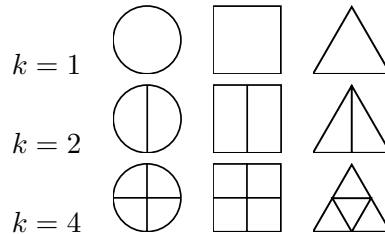
Par conséquent, lorsque l'on cherche une k -partition minimale, on commence tout d'abord par regarder s'il existe un vecteur propre associé à $\lambda_k(\Omega)$ ayant k ensembles nodaux. Si un tel vecteur propre existe, il fournit une k -partition minimale. Sinon, aucun vecteur propre du Laplacien-Dirichlet sur Ω ne fournira une k -partition minimale.

Donnons trois exemples très simples : le disque Di , le carré Sq et le triangle équilatéral Tr .

Pour chacun de ces domaines, on a :

$$\mathfrak{L}_k(\Omega) = \lambda_k(\Omega), \text{ pour } k = 1, 2, 4,$$

$$\lambda_3(\Omega) < \mathfrak{L}_3(\Omega) < V_3(\Omega).$$



Dans le cas du rectangle $\mathbf{R}_{a,b} =]-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}[\times]-\frac{b}{2}, \frac{b}{2}[$ avec $0 < a \leq b$ et $\frac{a^2}{b^2}$ irrationnel, on a alors

$$V_k(\mathbf{R}_{a,b}) = \pi^2 \min_{mn=k} \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} \right).$$

Helfffer-Hoffmann-Ostenhof-Terracini [HHT09] ont montré que les vecteurs propres sur $\mathbf{R}_{a,b}$ ne sont jamais Courant-sharp hormis, éventuellement, lorsque

4.2 3-partitions symétriques

1. $m = 3, n = 2$ et $\frac{3}{5} \leq \frac{a^2}{b^2} \leq \frac{5}{8}$,
2. $m = 2, n = 2$ et $\frac{3}{5} \leq \frac{a^2}{b^2} \leq 1$,
3. $m = 1, n > 1$ et $\frac{a^2}{b^2} \leq \frac{3}{n^2 - 1}$.

Dans le cas des 3-partitions, on déduit que $\lambda_3(\mathbf{R}_{a,b})$ est Courant-sharp si et seulement si $\frac{a}{b} \leq \sqrt{\frac{3}{8}}$.

Il s'agit maintenant de proposer une méthode pour déterminer les partitions minimales non bipartites. Pour cela, on peut se ramener aux 2-partitions minimales que l'on détermine facilement à l'aide des partitions nodales :

Proposition 4.1.14. Soient $k \geq 3$ et $\mathcal{D} = (D_i)_{1 \leq i \leq k}$ une k -partition minimale de Ω . Alors pour tous sous-domaines voisins $D_i \sim D_j$, $\mathfrak{L}_k(\Omega)$ est la seconde valeur propre du Laplacien-Dirichlet sur $D_{ij} = \text{Int}(\overline{D_i} \cup \overline{D_j})$ et D_i et D_j sont les 2 ensembles nodaux d'un vecteur propre associé. On a alors

$$\mathfrak{L}_k(\Omega) = \lambda_2(D_{ij}).$$

Cette proposition conduit naturellement à l'algorithme itératif proposé par Bozorgnia [Boz09] :

Algorithme.

Initialisation. Soit $\mathcal{D}^0 = (D_1^0, D_2^0, D_3^0)$ une 3-partition de Ω .

Itération. Pour $n \geq 1$, on définit la partition $\mathcal{D}^n = (D_1^n, D_2^n, D_3^n)$ telle que $D_1^n = D_3^{n-1}$ et (D_2^n, D_3^n) est la partition nodale d'un vecteur propre associé à $\lambda_2(\Omega \setminus \overline{D_1^n})$.

Si cet algorithme converge vers une partition $\mathcal{D} = (D_1, D_2, D_3)$, alors $\lambda_1(D_1) = \lambda_1(D_2) = \lambda_1(D_3)$.

Des mises en œuvre de cet algorithme sont données à la Figure 4.1 et disponibles à l'adresse

<http://w3.bretagne.ens-cachan.fr/math/simulations/MinimalPartitions/form3.php>

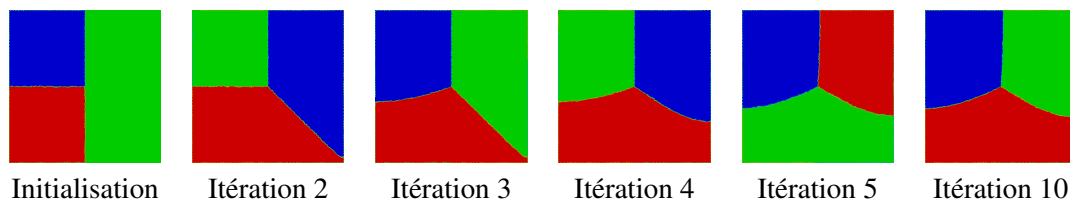


FIGURE 4.1 – Algorithme itératif.

4.2 3-partitions symétriques

Cette partie est détaillée dans l'article [BHV10]. On se restreint dans cette section à des domaines Ω symétriques par rapport à un axe σ et on cherche à déterminer les 3-partitions minimales. On essaie de répondre aux deux questions suivantes :

1. Existe-t-il des 3-partitions minimales symétriques lorsque le domaine Ω est symétrique ?
2. Si oui, comment les déterminer ?

4.2.1 Topologie des 3-partitions minimales symétriques

Commençons par étudier le problème de minimisation de $\Lambda_k(\mathcal{D})$ parmi les partitions symétriques, c'est-à-dire les partitions qui vérifient

$$\sigma(D_i) = D_i \text{ pour } i = 1, 2, 3 \quad \text{ou} \quad \sigma(D_1) = D_2, \sigma(D_3) = D_3.$$

Si la 3-partition est bipartite, il existe un vecteur propre associé à $\mathcal{L}_3(\Omega)$ qui est Courant-sharp et qui forme une 3-partition minimale. Supposons donc que la 3-partition minimale ne soit pas bipartite. Alors elle a nécessairement une des trois structures suivantes dont les topologies sont représentées à la Figure 4.2 :

- (a). La 3-partition a un point critique sur l'axe de symétrie (cf. Figure 4.2(a)).
- (b). La 3-partition a deux points critiques intérieurs sur l'axe de symétrie (cf. Figure 4.2(b)).
- (c). La 3-partition a deux points critiques intérieurs sur l'axe de symétrie et deux points critiques sur le bord de Ω et l'axe de symétrie (cf. Figure 4.2(c)).

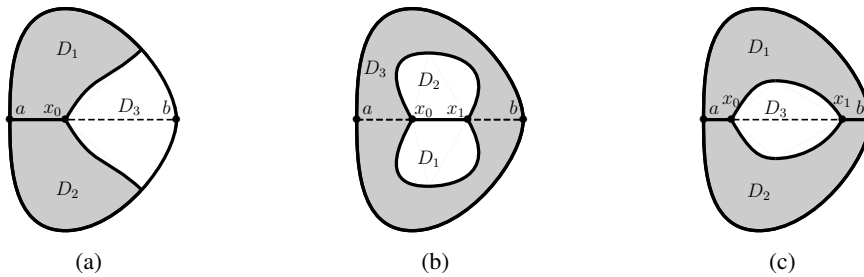


FIGURE 4.2 – Topologie des 3-partitions minimales non bipartites.

On suppose que l'axe de symétrie de Ω est la droite $\{y = 0\}$. On note x_i les points critiques intérieurs et (a, b) la droite $\Omega \cap \{y = 0\}$. Utilisons la Proposition 4.1.14. Supposons que $\mathcal{D} = (D_1, D_2, D_3)$ est une 3-partition minimale de type (a), (b) ou (c). Alors (D_1, D_3) est une 2-partition minimale pour $D_{13} = \text{Int}(\overline{D_1} \cup \overline{D_3})$. Par symétrie, on se ramène à étudier l'un des problèmes mixtes suivants sur le demi-domaine $\Omega^+ = \Omega \cap \{y > 0\}$:

$$\begin{cases} -\Delta\varphi = \lambda\varphi & \text{sur } \Omega^+, \\ \partial_{\mathbf{n}}\varphi = 0 & \text{sur } [x_0, b] \text{ ou } [a, x_0] \cup [x_1, b] \text{ ou } [x_0, x_1], \\ \varphi = 0 & \text{ailleurs.} \end{cases} \quad (4.2.1)$$

Sur l'axe de symétrie, ceci correspond à une condition de type Dirichlet-Neumann dans le cas (a), Neumann-Dirichlet-Neumann dans le cas (b) et Dirichlet-Neumann-Dirichlet dans le cas (c). On cherche alors à déterminer les paramètres x_0 et x_1 de façon à ce que les ensembles nodaux de φ fournissent une 3-partition après symétrisation et que 3 lignes nodales se terminent au point critique. Notons que lorsqu'en fixant $x_0 = a$ pour la configuration (b) ou $x_1 = b$ pour la configuration (c), on retrouve alors la configuration (a).

4.2.2 Résultats numériques

Nous avons utilisé la librairie d'éléments finis MÉLINA [Ma07] et calculé les modes propres des problèmes mixtes (4.2.1) pour les paramètres $(x_0, x_1) \in \{(a + i\delta, a + j\delta), 0 \leq i \leq j \leq N\}$ avec $\delta = (b - a)/N$ et $N = 30$ ou 40 selon les géométries. Nous avons fait des simulations numériques

4.2 3-partitions symétriques

complètes pour les trois géométries suivantes : le carré, le disque et la réunion de 3 hexagones. Les simulations sont disponibles à l'adresse suivante :

<http://w3.bretagne.ens-cachan.fr/math/simulations/MinimalPartitions/form2.php>

On remarque que les configurations de type (b) ou (c), avec $a < x_0 < x_1 < b$, ne permettent pas de produire de candidats pour les 3-partitions car les vecteurs propres n'ont que deux ensembles nodaux après symétrie. Nous obtenons des candidats en étudiant les configurations de type (a) (cf. Figures 4.3, 4.4, 4.5). Dans le cas du carré, on peut utiliser les deux symétries, par la médiatrice ou la diagonale, pour exhiber des candidats de type (a), (b) ou (c). Nous obtenons alors deux candidats représentés à la Figure 4.3 qui semble avoir la même énergie $\Lambda(\mathcal{D}_0) \simeq \Lambda(\mathcal{D}_1)$ et pour ces partitions, le point x_0 est le centre de symétrie du carré. Dans le cas du triangle équilatéral, nous avons cherché des candidats de type (a). Nous obtenons deux candidats représentés à la Figure 4.4 mais les énergies sont différentes et le deuxième candidat est à exclure. La Figure 4.5 propose des candidats pour d'autres géométries.

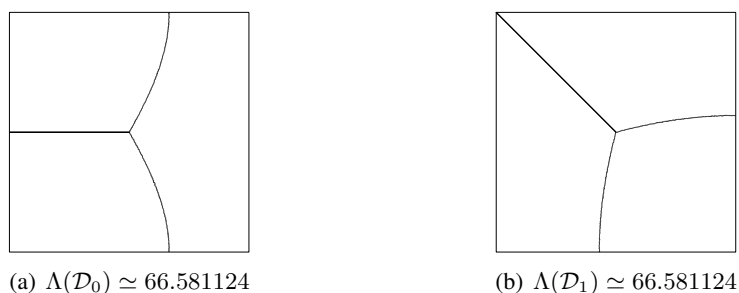


FIGURE 4.3 – Candidats symétriques pour le carré.



FIGURE 4.4 – Candidats symétriques pour le triangle.

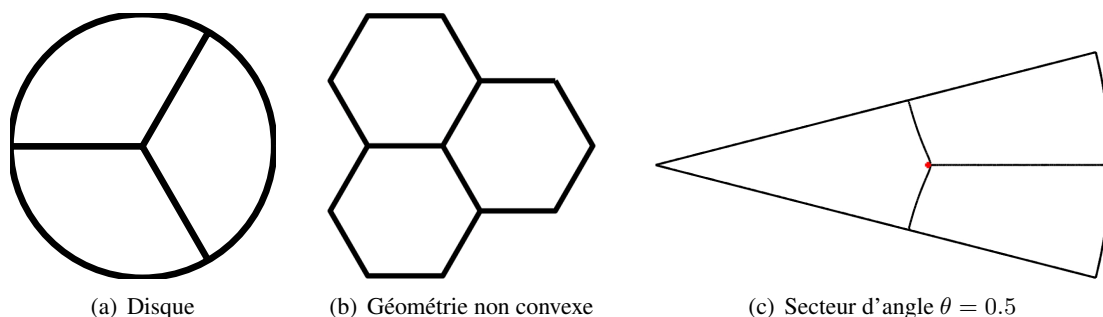


FIGURE 4.5 – Candidats symétriques.

4.3 Opérateur de Aharonov-Bohm

Cette section reprend quelques résultats de [BHH09] et se base sur [BR99, HHHO99]. En reprenant la Figure 4.3, on souhaite justifier l'égalité d'énergie $\Lambda_3(\mathcal{D}_0) = \Lambda_3(\mathcal{D}_1)$ et montrer qu'il existe une famille continue de partitions $(\mathcal{D}_t)_{0 \leq t \leq 1}$ avec la même énergie.

4.3.1 Définitions

On suppose que Ω est un ouvert de $\mathbb{R}^2$ tel que $0 \in \Omega$. On considère $X = (x_0, y_0) \in \Omega$ et on note $\dot{\Omega}_X = \Omega \setminus \{X\}$ le domaine pointé. On considère le potentiel magnétique de flux $\Phi = \frac{1}{2}$:

$$\mathbf{A}^X(x, y) = (A_1^X(x, y), A_2^X(x, y)) = \frac{1}{2} \left(-\frac{y - y_0}{r^2}, \frac{x - x_0}{r^2} \right).$$

Le Hamiltonien de Aharonov-Bohm avec pôle en X est défini comme l'extension de Friedrichs à partir de $C_0^\infty(\dot{\Omega}_X)$ de l'opérateur

$$-\Delta_{\mathbf{A}^X} := (D_x - A_1^X)^2 + (D_y - A_2^X)^2.$$

On omettra l'exposant X lorsqu'on choisit $X = (0, 0)$. L'opérateur de Aharonov-Bohm $-\Delta_{\mathbf{A}^X}$ commute avec l'opérateur anti-linéaire $K = e^{i\theta} \Gamma$ où on a noté Γ la conjugaison complexe ($\Gamma u = \bar{u}$). On peut ainsi trouver une base de vecteurs propres K -réelles, c'est-à-dire qu'ils vérifient $Ku = u$.

4.3.2 Isospectralité

On s'intéresse d'abord à des domaines qui ont les mêmes symétries que le rectangle. On suppose que

$$\sigma_1 \dot{\Omega} = \dot{\Omega} \quad \text{et} \quad \sigma_2 \dot{\Omega} = \dot{\Omega},$$

où σ_1 et σ_2 sont les symétries

$$\sigma_1(x, y) = (-x, y), \quad \sigma_2(x, y) = (x, -y). \quad (4.3.1)$$

On peut alors définir les opérateurs anti-linéaires associés :

$$\Sigma_1^c := i\Gamma \Sigma_1 \quad \text{et} \quad \Sigma_2^c := \Gamma \Sigma_2 \quad \text{avec} \quad \Sigma_j u(x, y) = u(\sigma_j(x, y)).$$

On décompose l'espace des fonctions K -réelles selon les fonctions symétriques et antisymétriques :

$$L_K^2(\dot{\Omega}) = L_{K, \Sigma_j}^2 \oplus L_{K, a \Sigma_j}^2,$$

avec $L_K^2(\dot{\Omega}) = \{u \in L^2(\dot{\Omega}), Ku = u\}$ et

$$L_{K, \Sigma_j}^2 = \{u \in L_K^2, \Sigma_j^c u = u\}, \quad L_{K, a \Sigma_j}^2 = \{u \in L_K^2, \Sigma_j^c u = -u\}.$$

On note $-\Delta_{\mathbf{A}, (a) \Sigma_j}$ la restriction de l'opérateur de Aharonov-Bohm $-\Delta_{\mathbf{A}}$ à l'espace $L_{K, (a) \Sigma_j}^2$. On montre alors le résultat d'isospectralité suivant :

Théorème 4.3.1. *Les opérateurs $-\Delta_{\mathbf{A}, \Sigma_1}$, $-\Delta_{\mathbf{A}, a \Sigma_1}$, $-\Delta_{\mathbf{A}, \Sigma_2}$ et $-\Delta_{\mathbf{A}, a \Sigma_2}$ sont isospectraux à l'opérateur $-\Delta_{\mathbf{A}}$. De plus λ est une valeur propre de l'un des quatre premiers opérateurs de multiplicité $k(\lambda)$ si et seulement si λ est une valeur propre de multiplicité $2k(\lambda)$ de $-\Delta_{\mathbf{A}}$.*

4.3 Opérateur de Aharonov-Bohm

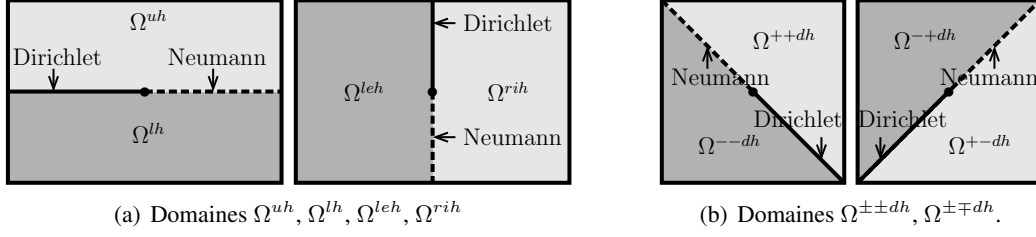


FIGURE 4.6 – Problèmes de type Dirichlet-Neumann sur les demi-domaines.

Pour plus de lisibilité, on considère plus simplement $\Omega = \mathbf{R}_{a,b}$. On peut montrer que les fonctions régulières de L^2_{K,Σ_2} sont nulles sur $[-\frac{a}{2}, 0] \times \{0\}$. Cette remarque permet de relier certains vecteurs propres de $-\Delta_{\mathbf{A}}$ avec les vecteurs propres de problèmes Dirichlet-Neumann sur les demi-domaines de type (4.2.1). On définit (cf. Figure 4.6(a))

$$\Omega^{uh} = \Omega \cap \{y > 0\}, \quad \Omega^{lh} = \Omega \cap \{y < 0\}, \quad \Omega^{le h} = \Omega \cap \{x < 0\}, \quad \Omega^{ri h} = \Omega \cap \{x > 0\}. \quad (4.3.2)$$

On a alors la proposition

Théorème 4.3.2. *Si u est un vecteur propre de $-\Delta_{\mathbf{A}}$, K -réel et invariant par Σ_2^c , alors la restriction à Ω^{uh} de $e^{-i\frac{\theta}{2}} u$ (avec $\theta \in (-\pi, \pi)$) est un vecteur propre réel du Laplacien sur Ω^{uh} , avec une condition de type Dirichlet-Neumann sur $\partial\Omega^{uh}$: Dirichlet partout sauf sur $(0, \frac{a}{2}] \times \{0\}$ où l'on impose une condition de Neumann. En particulier, si λ est une valeur propre de $-\Delta_{\mathbf{A}}$, alors c'est une valeur propre du Laplacien sur Ω^{uh} avec cette condition de Dirichlet-Neumann.*

De même, si u est un vecteur propre de $-\Delta_{\mathbf{A}}$, K -réel et invariant par Σ_1^c , alors la restriction à $\Omega^{ri h}$ de $e^{-i\frac{\theta}{2}} u$ (avec $\theta \in (-\frac{3\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$) est un vecteur propre réel du Laplacien sur $\Omega^{ri h}$, avec une condition de type Dirichlet-Neumann sur $\partial\Omega^{ri h}$: Dirichlet partout sauf sur $\{0\} \times (-\frac{b}{2}, 0]$ où l'on impose une condition de Neumann. En particulier, si λ est une valeur propre de $-\Delta_{\mathbf{A}}$, alors c'est une valeur propre du Laplacien sur $\Omega^{ri h}$ avec cette condition de Dirichlet-Neumann.

Revenons maintenant au cas du carré. On note $r_{\frac{\pi}{2}}$ la rotation d'angle $\frac{\pi}{2}$. On définit l'opérateur de rotation $\mathcal{R}_{\frac{\pi}{2}} u(\cdot) = u(r_{\frac{\pi}{2}} \cdot)$ qui commute avec $-\Delta_{\mathbf{A}}$. Comme précédemment, on définit les domaines représentés à la Figure 4.6(b) :

$$\begin{aligned} \Omega^{--dh} &= \Omega \cap \{x + y < 0\}, & \Omega^{++dh} &= \Omega \cap \{x + y > 0\}, \\ \Omega^{+-dh} &= \Omega \cap \{x - y > 0\}, & \Omega^{-+dh} &= \Omega \cap \{x - y < 0\}. \end{aligned}$$

On a alors le résultat d'isospectralité suivant

Théorème 4.3.3. *Les problèmes du Laplacien Dirichlet-Neumann sur les quatre demi-domaines $\Omega^{\pm\pm dh}$, $\Omega^{\pm\mp dh}$ sont isospectraux à ceux introduits à la Proposition 4.3.2.*

On montre ainsi que les problèmes suivants ont les mêmes valeurs propres :

- L'opérateur d'Aharonov-Bohm sur $\dot{\Omega}$ avec condition de Dirichlet,
- Le Laplacien avec condition de Dirichlet-Neumann sur Ω^{uh} , $\Omega^{le h}$ ou Ω^{lh} , $\Omega^{ri h}$,
- Le Laplacien avec condition de Dirichlet-Neumann sur Ω^{++dh} , Ω^{--dh} ou Ω^{+-dh} , Ω^{-+dh} .

L'introduction de l'opérateur de Aharonov-Bohm a permis de montrer que les partitions $\mathcal{D}_0$ et $\mathcal{D}_1$ de la Figure 4.3 (avec un point critique au centre de symétrie du carré) satisfont

$$\Lambda_3(\mathcal{D}_0) = \Lambda_3(\mathcal{D}_1).$$

On notera $\Lambda_3^*(Sq)$ cette valeur.

4.3.3 L'approche par revêtement

Cette approche a été utilisée dans [Bé89, Bé92, Bé93, BB80] et plus récemment dans [JLNP06, LPP06, HHT09, HH10a, HHT10a, HHT10b] pour montrer des résultats d'isospectralité. Elle a en outre permis de montrer (cf. [HHT10b]) que la 3-partition représentée à la Figure 4.7 est minimale pour la sphère.

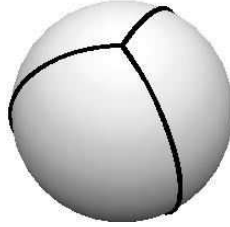


FIGURE 4.7 – 3-partition minimale pour la sphère.

Dans cette partie, nous regardons le comportement du spectre de l'opérateur de Aharonov-Bohm en fonction de la position du point singulier avec plusieurs objectifs :

- Construire une famille continue de 3-partitions $(\mathcal{D}_t)_{0 \leq t \leq 1}$ telle que $\Lambda_3(\mathcal{D}_t) = \Lambda_3(\mathcal{D}_0)$ et ainsi exhiber des 3-partitions non symétriques.
- Mettre en évidence les déformations des ensembles nodaux et les transitions entre les différentes structures nodales lorsque l'on bouge le point singulier X . Ceci permet d'illustrer les résultats de [HHHO99] et de [NT09].

Plus de détails sont mentionnés dans l'article [BH11] et des simulations numériques sont disponibles à l'adresse :

<http://w3.bretagne.ens-cachan.fr/math/simulations/MinimalPartitions/CoveringSquare.php>

Au lieu de calculer les modes propres de l'opérateur $-\Delta_{\mathbf{A}^X}$ sur $\dot{\Omega}_X$, nous préférons utiliser l'approche du revêtement. Soit $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$ le revêtement à deux feuillets de $\dot{\Omega}_X$. Notons $\mathcal{D}_X^{\mathcal{R}} : \dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}} \rightarrow \dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$ l'application passant d'un feuillet à l'autre, c'est-à-dire que ω et $\mathcal{D}_X^{\mathcal{R}}(\omega)$ ont la même projection sur $\dot{\Omega}_X$ pour tout $\omega \in \dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$. On peut alors identifier les vecteurs propres de $-\Delta_{\mathbf{A}^X}$ aux vecteurs propres réels antisymétriques du Laplacien-Dirichlet sur $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$.

Notation 4.3.4. *On note*

- $\lambda_k(\Omega)$ la k^e valeur propre du Laplacien-Dirichlet sur Ω ,
- $\lambda_k^{AB}(\Omega_X)$ la k^e valeur propre du Hamiltonien de Aharonov-Bohm avec pôle en X ,
- $\lambda_k(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}})$ la k^e valeur propre du Laplacien-Dirichlet sur $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$.

En utilisant la décomposition de $L^2(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}})$ entre fonctions symétriques et antisymétriques, on voit facilement que le spectre de l'opérateur de Laplace-Dirichlet sur le revêtement $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$ correspond

- soit aux vecteurs propres de Ω relevés sur $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$ par symétrie. Il s'agit alors du spectre de l'opérateur de Laplace-Dirichlet sur le carré.
- soit des vecteurs propres $\mathcal{D}_X^{\mathcal{R}}$ -antisymétriques. Il s'agit du spectre du Hamiltonien de Aharonov-Bohm avec pôle en X .

4.3.4 Simulations numériques

Construction d'un maillage de $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$

Nous avons utilisé la méthode des éléments finis pour calculer les modes propres de l'opérateur de Laplace-Dirichlet sur le revêtement à deux feuillets $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$. Nous avons utilisé la librairie d'éléments

4.3 Opérateur de Aharonov-Bohm

finis MÉLINA [Ma07]. L'originalité de ce travail a été de construire des maillages du revêtement $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$. Pour cela, nous avons utilisé le mailleur TRIANGLE [Sh05]. Expliquons la démarche. Considérons un domaine Ω , un pôle $X \in \Omega$ et un point O du bord $\partial\Omega$. On construit un maillage de Ω tel que :

- le segment joignant les points O et X ne traverse aucun élément du maillage,
- le segment $[O, X]$ est l'union d'un nombre pair d'arêtes du maillage,
- le pôle X est un sommet du maillage.

Ce maillage constitue le premier feuillet du maillage de $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$. On répète ce maillage pour le deuxième feuillet en échangeant les sommets du segment $[O, X]$ de façon à passer d'un feuillet à l'autre. Enfin, on supprime le pôle X du deuxième feuillet en l'identifiant à celui du premier feuillet.

Simulations numériques sur le carré

Présentons les résultats pour le carré $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$. Le théorème de Courant et le principe du Max-Min pour le Hamiltonien de Aharonov-Bohm avec pôle en X permettent de montrer la proposition suivante :

Théorème 4.3.5. *Soit $X \in [0, \frac{1}{2}] \times [0, \frac{1}{2}]$, alors*

$$\lambda_1(\Omega) = \lambda_1(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}), \quad \lambda_1^{\text{AB}X} = \lambda_2(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}), \quad \lambda_2^{\text{AB}X} = \lambda_3(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}). \quad (4.3.3)$$

Pour tout $k = 2, 4, 5$, il existe un entier ℓ_k tel que

$$\begin{aligned} \lambda_2^{\text{AB}X} &< \lambda_2(\Omega) = \lambda_{\ell_2}(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}) \quad \text{avec } \ell_2 \geq 4 \text{ (de multiplicité au moins 2),} \\ \lambda_3^{\text{AB}X} &\leq \lambda_4(\Omega) = \lambda_{\ell_4}(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}) \quad \text{avec } \ell_4 \geq 7, \\ \lambda_5(\Omega) &= \lambda_{\ell_5}(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}) \quad \text{avec } \ell_5 \geq 8. \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

Commençons par choisir $X = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ le centre du carré. La Figure 4.8 donne les lignes nodales des 8 premiers vecteurs propres et les valeurs propres associées. En regardant les valeurs propres et les lignes nodales, il est facile de distinguer le spectre symétrique et antisymétrique.

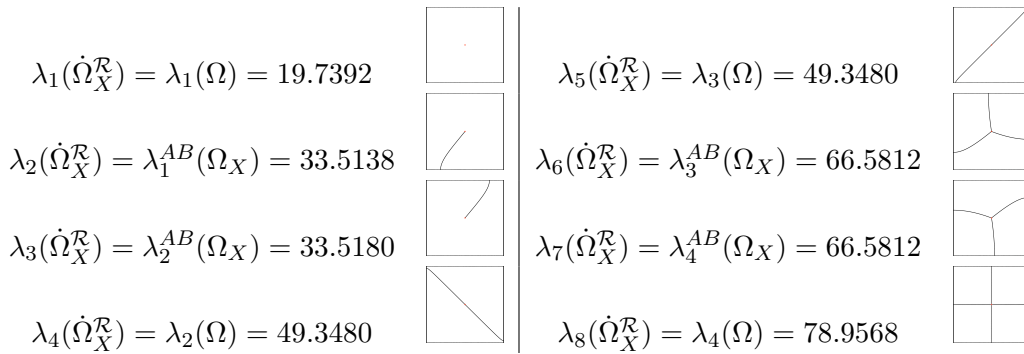


FIGURE 4.8 – Modes propres de $-\Delta_{\mathbf{A}X}$ pour $X = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

La 3^e valeur propre de $-\Delta_{\mathbf{A}X}$ avec $X = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ est double. On remarque que les vecteurs propres $u_3^{\text{AB}}, u_4^{\text{AB}}$ associés sont des 3-partitions non symétriques et on peut construire une famille continue de 3-partitions ayant la même énergie à l'aide d'une combinaison linéaire de u_3^{AB} et u_4^{AB} , cf. Figure 4.9.

Regardons maintenant le comportement du spectre de $-\Delta_{\mathbf{A}X}$ en fonction de X qui se déplace sur un des axes de symétrie. La Figure 4.10(a) représente les valeurs propres lorsque $X = (x, x)$, $0 \leq x \leq \frac{1}{2}$ et la Figure 4.10(b) celle lorsque $X = (x, \frac{1}{2})$ avec $0 \leq x \leq \frac{1}{2}$. On illustre ainsi le résultat annoncé par

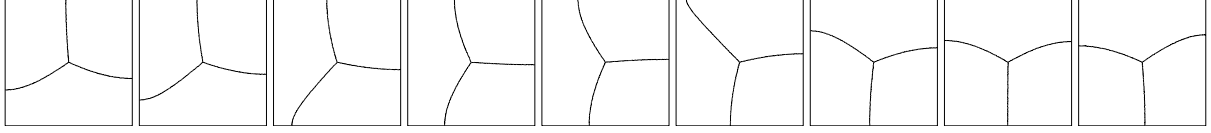
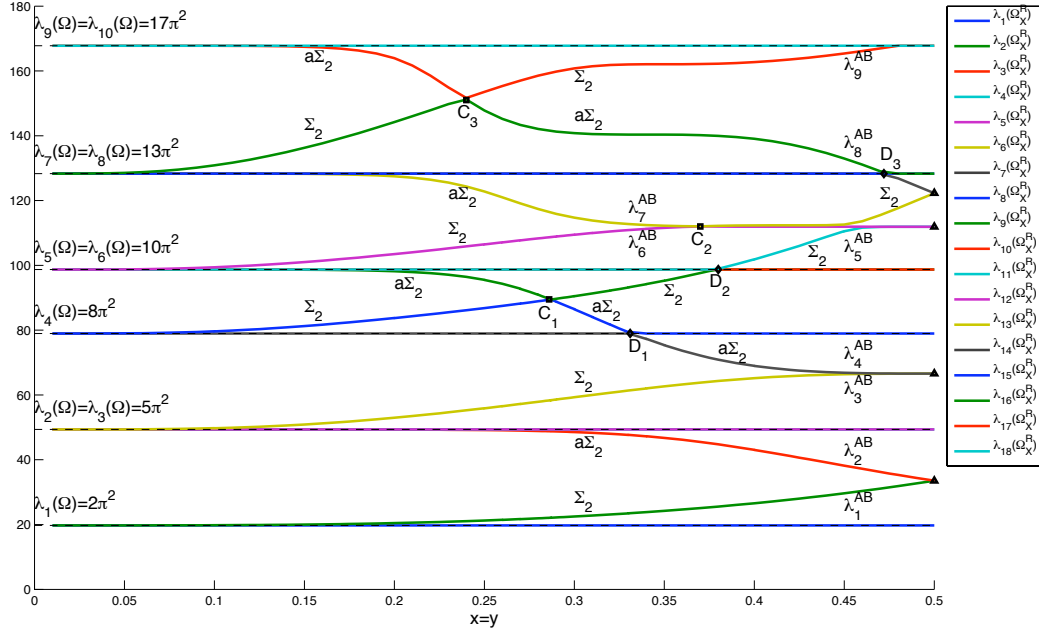
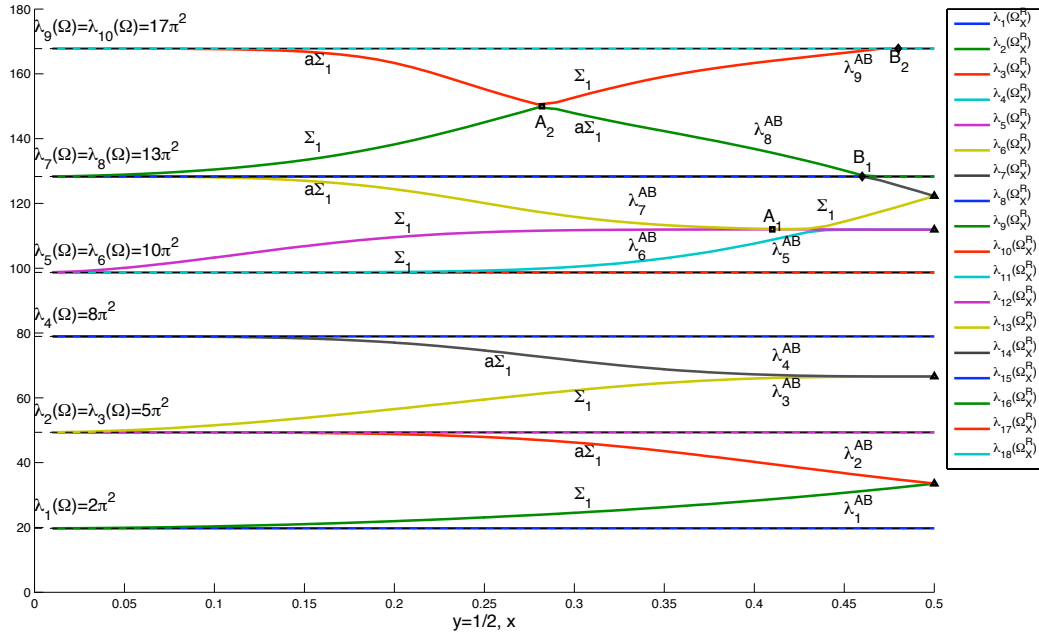

 FIGURE 4.9 – Lignes nodales de $tu_6^{AB} + (1-t)u_7^{AB}$, $t = k/8$, $k = 0, \dots, 8$.

 (a) $\lambda_k(\dot{\Omega}_X^R)$, $X = (x, x)$, $0 < x \leq \frac{1}{2}$

 (b) $\lambda_k(\dot{\Omega}_X^R)$, $X = (x, \frac{1}{2})$, $0 < x \leq \frac{1}{2}$

 FIGURE 4.10 – Comportement des valeurs propres lorsque X est sur un axe de symétrie.

4.3 Opérateur de Aharonov-Bohm

Noris et Terracini :

$$\lim_{X \rightarrow \partial\Omega} \lambda_k^{AB}(\Omega_X) = \lambda_k(\Omega). \quad (4.3.5)$$

On remarque par ailleurs que les valeurs propres de Aharonov-Bohm sont doubles lorsque X est le centre du carré. En regardant les Figures 4.10(a) et 4.10(b), on observe en C_j et A_j des croisements éventuels des valeurs propres de l'opérateur de Aharonov-Bohm $-\Delta_{\mathbf{A}^{C_j}}$ ou $-\Delta_{\mathbf{A}^{A_j}}$. Pour savoir s'il s'agit de croisements évités ou non, il suffit de regarder les lignes nodales des vecteurs propres. Celles-ci sont représentées aux Figures 4.11(a) et 4.11(b) au voisinage des points C_1 et A_1 . Les résultats sont simi-

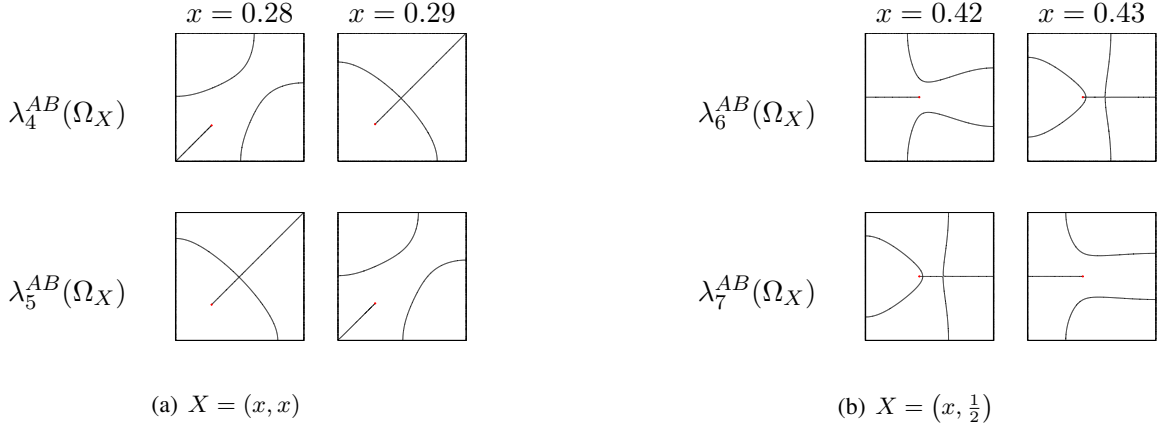


FIGURE 4.11 – Lignes nodales associées à $\lambda_k^{AB}(\Omega_X)$.

lares au voisinage des autres points. Le changement de symétrie des lignes nodales montre qu'il s'agit d'un vrai croisement et donc qu'il existe des points C_1^* et A_1^* tels que les valeurs propres $\lambda_4^{AB}(\Omega_{C_1^*})$ et $\lambda_6^{AB}(\Omega_{A_1^*})$ sont doubles.

Regardons maintenant le comportement du spectre et des lignes nodales des vecteurs propres associés lorsque $X \in \mathcal{P} = \{(\frac{i}{100}, \frac{j}{100}), 1 \leq i, j \leq 50\}$. Les simulations numériques laissent supposer que l'on peut préciser la relation (4.3.4) car on observe les égalités :

$$\lambda_4(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}) = \lambda_2(\Omega), \quad \lambda_5(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}) = \lambda_2(\Omega), \quad \lambda_6(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}) = \lambda_3^{\mathbf{AB}^X}(\Omega).$$

La Figure 4.12 illustre à nouveau le résultat (4.3.5) de [NT09] car les valeurs propres sur le revêtement $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$ convergent vers les valeurs propres du carré lorsque le point X se rapproche du bord $\partial\Omega$. On observe par ailleurs que

$$\max_{X \in \mathcal{P}} \lambda_2(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}) = \min_{X \in \mathcal{P}} \lambda_3(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}), \quad \max_{X \in \mathcal{P}} \lambda_6(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}) = \min_{X \in \mathcal{P}} \lambda_7(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}) = \Lambda_3^*(Sq).$$

De plus, les extrema sont atteints lorsque $X = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ est le centre du carré.

Les Figures 4.13, 4.14(a) et 4.14(b) représentent les lignes nodales des vecteurs propres associés à $\lambda_k(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}})$ avec $k = 6, 7, 8$. Le point singulier X est repéré par un point rouge. Les valeurs propres (connues pour le carré) et la symétrie des vecteurs propres en passant d'un feuillet à l'autre permettent déterminer si la valeur propre $\lambda_k(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}})$ est un élément du spectre symétrique (spectre de l'opérateur de Laplace-Dirichlet sur le carré) ou du spectre antisymétrique (spectre du Hamiltonien de Aharonov-Bohm sur le domaine pointé $\dot{\Omega}_X$). La Figure 4.13 suggère donc que tout vecteur propre associé à $\lambda_3^{\mathbf{AB}^X}(\Omega)$ n'a que deux ensembles nodaux sauf lorsque X est le centre du carré. En regardant les Figures 4.14(a)

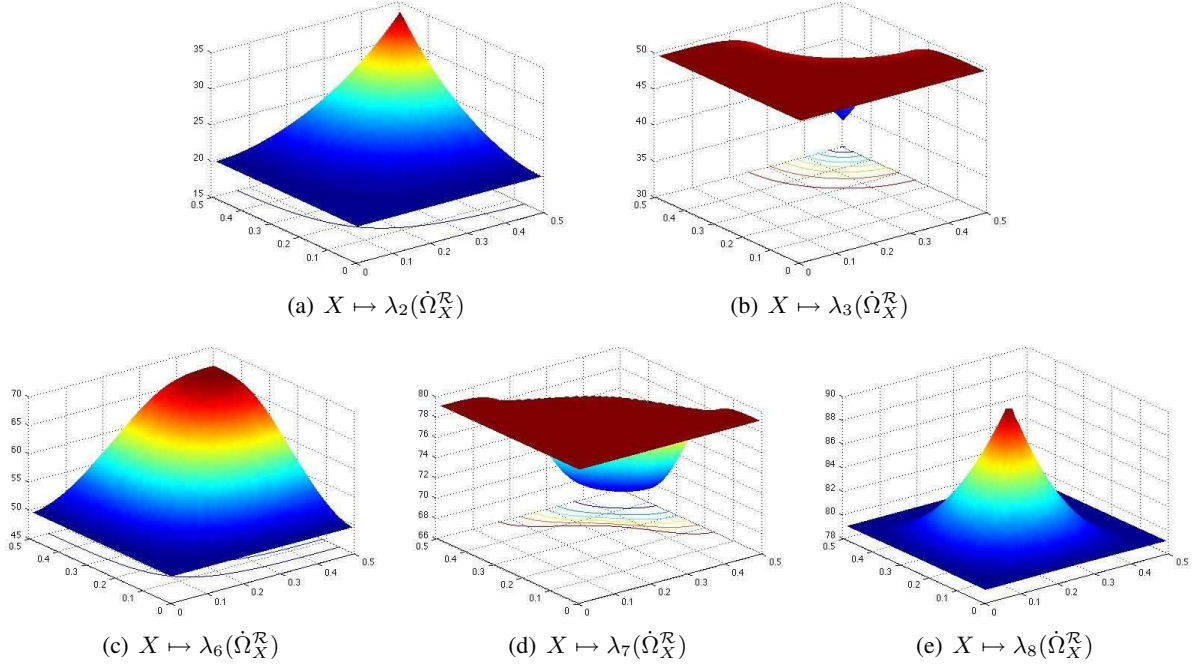

 FIGURE 4.12 – Valeurs propres sur le revêtement $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$ lorsque $X \in \mathcal{P}$.

 FIGURE 4.13 – Lignes nodales des vecteurs propres associés à $\lambda_6(\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}) = \lambda_3^{\text{ABX}}(\Omega)$.

et 4.14(b), on parvient à isoler les figures correspondant aux lignes nodales de vecteurs propres associés à $\lambda_4^{\text{ABX}}(\Omega)$. On remarque alors parmi ces candidats que la 3-partition optimale pour le critère (4.1.2) est atteinte lorsque le point singulier X est au centre du carré.

Lorsque l'on regarde les modes propres suivants, on peut illustrer les déformations de lignes nodales mentionnées dans [HHHO99] comme le montre la Figure 4.15 donnant les lignes nodales de vecteurs propres associés à $\lambda_5^{\text{ABX}}(\dot{\Omega}_X)$.

4.4 Mécanisme de déformation pour les 3-partitions

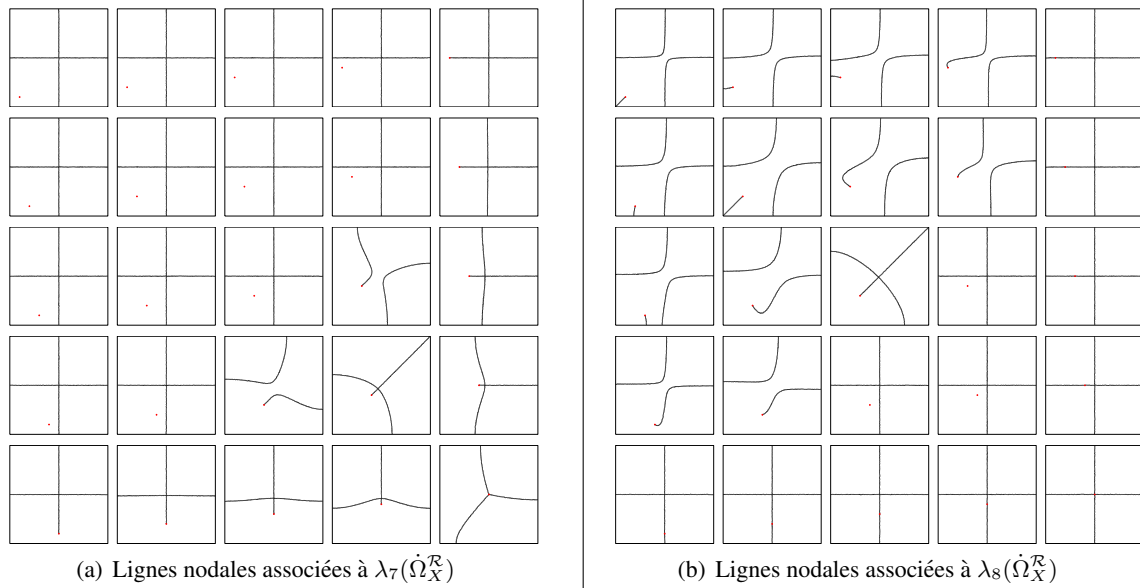


FIGURE 4.14 – Lignes nodales des vecteurs propres associés à $\lambda_4(\Omega)$ ou $\lambda_3^{\mathbf{AB}X}(\Omega)$.

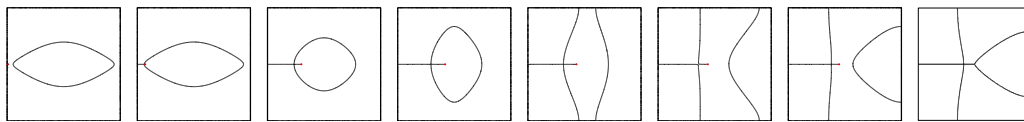


FIGURE 4.15 – Lignes nodales des vecteurs propres associés à $\lambda_5^{\mathbf{AB}X}(\Omega)$, $X = (\frac{i}{100}, \frac{1}{2})$, $i = 1, 7, 30, 42, 43, 44, 45, 50$.

4.4 Mécanisme de déformation pour les 3-partitions

En déformant différentes géométries telles que le rectangle, l'ellipse ou le secteur angulaire¹, on souhaite proposer un mécanisme de déformation et de transition entre les 3-partitions minimales bipartites et celles qui ne le sont plus.

Proposons un mécanisme dans le cas du rectangle $\mathbf{R}_{a,b}$ (cf. [BHH09]). On sait que lorsque $\frac{a}{b} \leq \sqrt{\frac{3}{8}}$, il existe un vecteur propre Courant-sharp associé $\lambda_3(\mathbf{R}_{a,b})$ et ce n'est plus le cas pour $\sqrt{\frac{3}{8}} < \frac{a}{b} \leq 1$. Ainsi

$$\mathfrak{L}_3(\mathbf{R}_{a,b}) = \lambda_3(\mathbf{R}_{a,b}) = \pi^2 \left(\frac{1}{a^2} + \frac{9}{b^2} \right) \text{ si et seulement si } \frac{a}{b} \leq \sqrt{\frac{3}{8}}.$$

Lorsque $\frac{a}{b} = \sqrt{\frac{3}{8}}$, la 3^e valeur propre est double et les vecteurs propres sont de la forme

$$\varphi_{\alpha,\beta}(x, y) = \alpha \cos \frac{x}{\epsilon} \cos 3y + \beta \sin \frac{2x}{\epsilon} \cos y \quad \text{avec} \quad \alpha^2 + \beta^2 \neq 0, \quad \epsilon = \sqrt{\frac{3}{8}}.$$

Aucun de ces vecteurs n'a de point critique intérieur. En étudiant les points critiques de $\varphi_{\alpha,\beta}$, on montre que deux lignes nodales se rejoignent en ce point critique si et seulement si $\alpha \pm 2\beta = 0$. La Figure 4.16(a) représente ce vecteur propre.

1. L'ellipse et le secteur angulaire sont deux géométries modèles qu'a commencé à étudier Corentin Léna [Lé] dans le cadre de sa thèse.

Lorsque $\frac{a}{b} < \sqrt{\frac{3}{8}}$, la partition nodale associée à $\lambda_3(\mathbf{R}_{a,b})$ nous donne une 3-partition minimale.

Lorsque $\frac{a}{b} > \sqrt{\frac{3}{8}}$, nous utilisons les problèmes mixtes (4.2.1) avec condition de Dirichlet-Neumann sur l'axe de symétrie et cherchons, comme dans le cas du carré, le meilleur candidat. La Figure 4.16 propose un mécanisme de transition entre partitions bipartites et non bipartites.

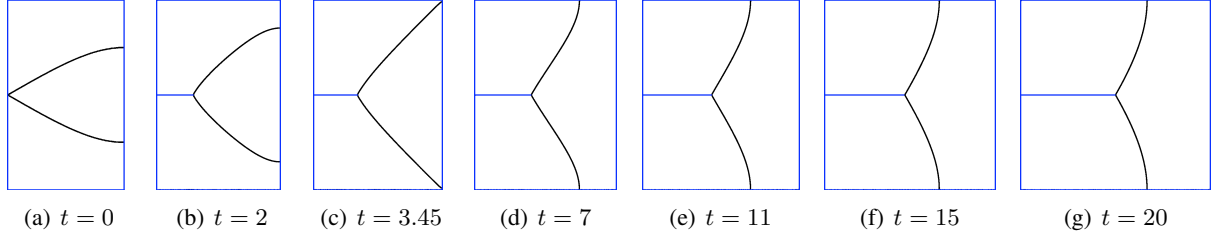


FIGURE 4.16 – Simulations pour les rectangles $\mathbf{R}_{a,b}$ avec $\frac{a}{b} = (1 - \frac{t}{20})\sqrt{\frac{3}{8}} + \frac{t}{20}$.

Nous pouvons procéder de même pour l'ellipse et les résultats sont représentés à la Figure 4.17.

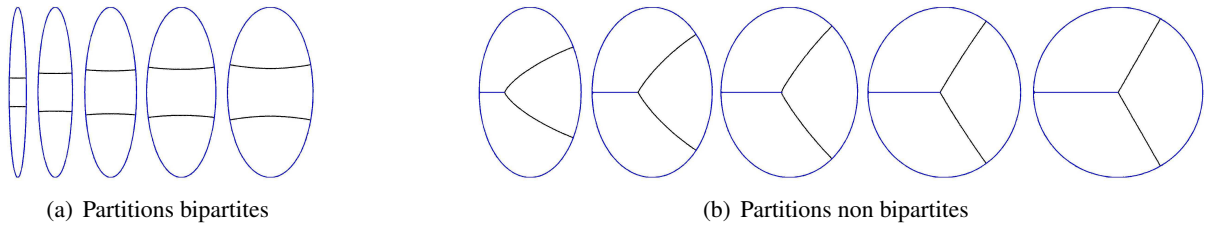


FIGURE 4.17 – Ellipses.

Dans le cas du secteur angulaire, $\Sigma_\Theta = \{(r, \theta), 0 < r < 1 \text{ et } 0 < \theta < \Theta\}$, les vecteurs propres sont explicites (cf. [Lé]). On peut montrer qu'il existe deux angles $\Theta_1^c < \Theta_2^c$ tels que les partitions nodales associées à $\lambda_3(\Sigma_\Theta)$ sont bipartites lorsque $\Theta \in (0, \Theta_1^c] \cup [\Theta_2^c, 2\pi]$. La Figure 4.18 représente les partitions nodales de vecteurs propres associés à $\lambda_3(\Sigma_\Theta)$. On constate alors que $\Theta_1^c < \frac{\pi}{5}$ et $\Theta_2^c > \frac{7\pi}{10}$. C. Léna [Lé] a donné des estimations précises de ces paramètres critiques à l'aide des fonctions de Bessel. En $\Theta = \Theta_1^c$, la 3^e valeur propre est double. Comme dans le cas du rectangle, on peut construire une nouvelle 3-partition, représentée à la Figure 4.19(a), avec un point critique sur l'arc de cercle. Pour un angle légèrement supérieur à Θ_1^c , nous ne pouvons plus utiliser les vecteurs propres pour proposer un candidat à être partition minimale. Nous pouvons chercher une 3-partition minimale symétrique en calculant les vecteurs propres de l'opérateur de Laplace-Dirichlet sur $\Omega_X^{\mathcal{R}}$ avec X sur l'axe de symétrie. Cela revient à étudier le problème mixte (4.2.1) avec une condition de type Dirichlet-Neumann. De ces simulations numériques, nous déduisons le candidat symétrique de la Figure 4.19(b). Une alternative est de déplacer le pôle X sur la perpendiculaire partant du point critique du bord (cf. Figure 4.19(a)). Nous obtenons alors, à la Figure 4.19(c), un nouveau candidat non symétrique dont l'énergie est plus basse. Il semble alors qu'on ait exhibé un domaine symétrique dont aucune 3-partition minimale ne soit pas symétrique.

Ces différentes géométries laissent penser qu'une dilatation avec un fort coefficient dans une direction rende le problème bipartite. Dans cet esprit, mentionnons l'article [FK08] qui montre ce résultat pour des tubes courbés à section constante suffisamment petite.

4.5 k -partitions pour $k \geq 5$

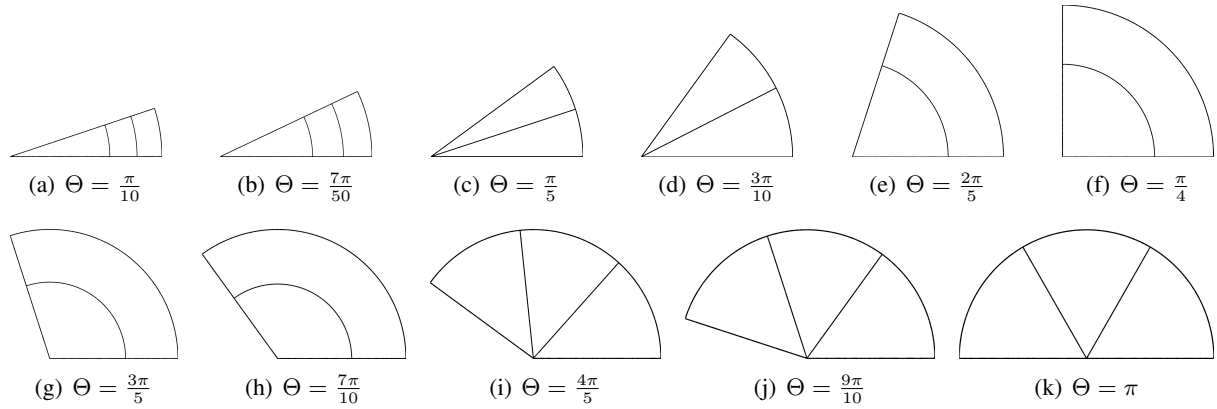


FIGURE 4.18 – Lignes nodales pour un vecteur propre associé à $\lambda_3(\Sigma_\Theta)$.

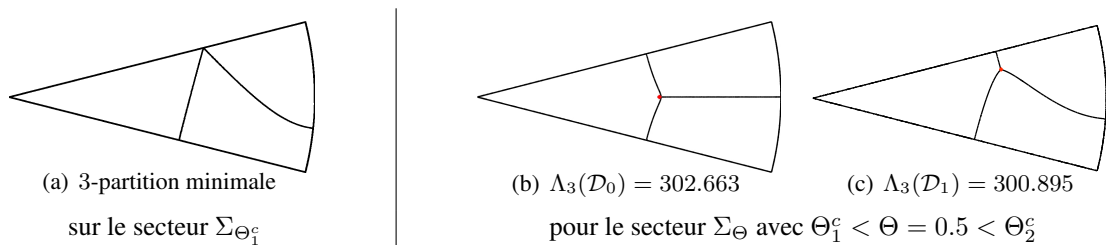


FIGURE 4.19 – Simulations numériques sur les secteurs angulaires.

4.5 k -partitions pour $k \geq 5$

4.5.1 5-partitions

Les simulations numériques pour l'opérateur de Laplace-Dirichlet sur $\dot{\Omega}_X^{\mathcal{R}}$ avec X le centre du carré ont permis d'obtenir une 5-partition nodale. En regardant les travaux de [CBH05], on utilise des arguments de symétrie et on étudie des problèmes mixtes du type (4.2.1) sur le huitième de carré, on obtient alors, à la Figure 4.20, de nouvelles 5-partitions dont l'une a une énergie plus basse. La Figure 4.5(a) propose le même style d'analyse pour le disque.

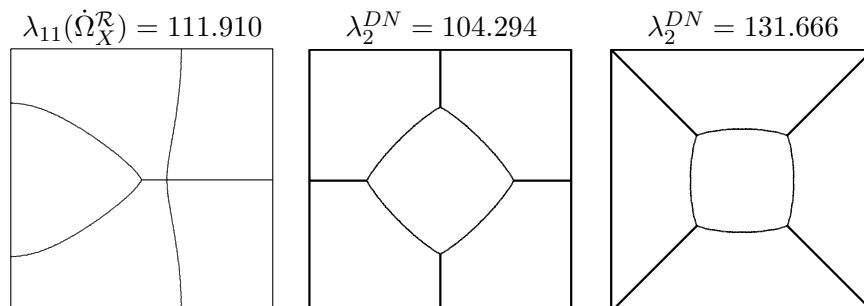


FIGURE 4.20 – Candidats pour la 5-partition du carré.

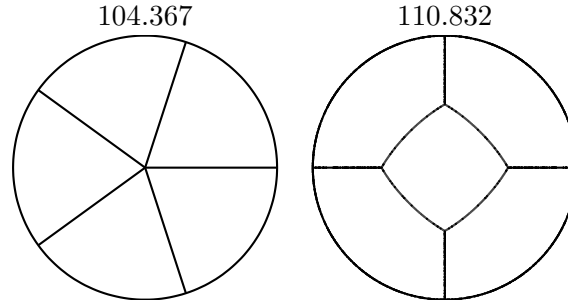


FIGURE 4.21 – Candidats pour la 5-partition du disque.

4.5.2 Asymptotique lorsque $k \rightarrow +\infty$

Dans [BHV10], nous avons testé numériquement la conjecture suivante.

Conjecture 4.5.1.

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\mathfrak{L}_k(\Omega)}{k} = \lambda_1(\text{Hexa}_1),$$

où Hexa_1 est l'hexagone régulier dont l'aire est normalisée.

Mentionnons les travaux [BBO10, CBH05] pour des simulations numériques avec d'autres critères.

4.6 Perspectives

4.6.1 Partitions minimales pour d'autres critères

De façon plus générale, on définit pour $(D_i)_{1 \leq i \leq k} \in \mathfrak{L}_k(\Omega)$ et $p \in [1, +\infty[$

$$\Lambda_{k,p}(\Omega) = \left(\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \lambda_1(D_i)^p \right)^{1/p}.$$

On peut alors étudier le problème de minimisation

$$\mathfrak{L}_{k,p}(\Omega) = \inf \{ \Lambda_{k,p}(\mathcal{D}), \mathcal{D} \in \mathcal{D}_k \}. \quad (4.6.1)$$

Le résultat d'existence de la Proposition 4.1.3 reste valable pour ce problème (cf. [BBH98, CL07, CTV05a]).

On peut montrer que

$$\mathfrak{L}_{k,1}(\Omega) \leq \mathfrak{L}_k(\Omega).$$

Il est alors intéressant de chercher les cas d'égalité et de voir si cette situation est générique ou non. Le cas des 2-partitions est déjà très difficile à traiter. D'une part, on sait que $\mathfrak{L}_2(\Omega) = \lambda_2(\Omega)$. En revanche, on ne peut se ramener à l'étude de partitions nodales pour calculer $\mathfrak{L}_{2,1}(\Omega)$. Dans [HH10b], Helffer et Hoffmann-Ostenhof ont montré que s'il existait un vecteur propre φ_2 associé à $\lambda_2(\Omega)$ tel que $\|\varphi_2\|_{L^2(D_1)} \neq \|\varphi_2\|_{L^2(D_2)}$, où (D_1, D_2) est la partition nodale de φ_2 , alors $\mathfrak{L}_{2,1}(\Omega) < \mathfrak{L}_2(\Omega)$. Ce critère est satisfait dans le cas du triangle équilatéral et laisse suggérer que $\mathfrak{L}_{2,1}(\Omega) < \mathfrak{L}_2(\Omega)$ de façon générique. Dans le cas du carré et du disque, nous ne connaissons pas la réponse.

Mentionnons les articles [CBH05, CLLL04] qui proposent des algorithmes pour déterminer des k -partitions et on remarque que celles proposées dans [CBH05] pour certaines k -partitions du carré ressemblent aux candidats que nous avons obtenus pour $\mathfrak{L}_k(Sq)$ lorsque $k = 2, 3, 5$.

4.6 Perspectives

4.6.2 Caractérisation de $\mathfrak{L}_k(\Omega)$ à l'aide du Hamiltonien de Aharonov-Bohm

Lorsque l'on ajoute des pôles au Hamiltonien de Aharonov-Bohm, on pense pouvoir déterminer $\mathfrak{L}_k(\Omega)$ et une k -partition minimale, comme le suggère la conjecture suivante.

Conjecture 4.6.1. *Soit Ω un domaine ouvert simplement connexe de $\mathbb{R}^2$, alors*

$$\mathfrak{L}_k(\Omega) = \inf_{\ell \in \mathbb{N}} \inf_{X_1, \dots, X_\ell} L_k^{\text{AB}}(\dot{\Omega}_{X_1, \dots, X_\ell}).$$

Dans cette relation, on désigne par $L_k^{\text{AB}}(\dot{\Omega}_{X_1, \dots, X_\ell})$ la plus petite valeur propre du Hamiltonien de Aharonov-Bohm avec ℓ pôles en $X_1, \dots, X_\ell$ (cf. [HHHO99]), pour laquelle il existe un vecteur propre associé avec k ensembles nodaux.

D'un point de vue pratique, nous devons donc adapter les méthodes numériques pour traiter les opérateurs de Aharonov-Bohm avec plusieurs pôles. Dans le cas des 3-partitions minimales du carré, il faudra également chercher des candidats parmi les partitions nodales de l'opérateur de Aharonov-Bohm avec deux pôles. Une première étape sera d'adapter le code permettant de mailler un revêtement du domaine à deux feuillets avec un seul pôle à un revêtement avec deux pôles (puis ℓ pôles pour étudier les k -partitions). Il s'agira ensuite d'explorer numériquement les configurations possibles. Notons que cet algorithme ne pourra éventuellement être mis en œuvre que pour des petites valeurs de k .

4.6.3 3-partition minimale du carré et du disque

Pour des géométries très simples, telles que le carré et le disque, nous souhaiterions démontrer que les candidats que nous avons exhibés numériquement sont effectivement des 3-partitions minimales.

Conjecture 4.6.2. *Les 3-partitions représentées aux Figures 4.3, 4.9 et 4.5(a), c'est-à-dire les partitions nodales associées à $\lambda_3^{\text{AB}X}(\Omega)$, lorsque le pôle X est placé au centre de gravité du domaine sont minimales pour le carré et le disque.*

Bibliographie

- [AB03] F. Alouges and V. Bonnaillie. Analyse numérique de la supraconductivité. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 337(8), p. 543–548, 2003.
- [AB06] F. Alouges and V. Bonnaillie-Noël. Numerical computations of fundamental eigenstates for the Schrödinger operator under constant magnetic field. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 22(5), p. 1090–1105, 2006.
- [ABCT08] H. Ammari, E. Bonnetier, Y. Capdeboscq, M. Tanter, and M. Fink. Electrical impedance tomography by elastic deformation. *SIAM J. Appl. Math.*, 68(6), p. 1557–1573, 2008.
- [ABFFKL10] H. Ammari, E. Beretta, Elisa Francini, H. Kang, and M. Lim. Reconstruction of small interface changes of an inclusion from modal measurements II : the elastic case. *J. Math. Pures Appl. (9)*, 94(3), p. 322–339, 2010.
- [AGG97] C. Amrouche, V. Girault, and J. Giroire. Dirichlet and Neumann exterior problems for the n -dimensional Laplace operator : an approach in weighted Sobolev spaces. *J. Math. Pures Appl. (9)*, 76(1), p. 55–81, 1997.
- [AGJ10] H. Ammari, P. Garapon, and F. Jouve. Separation of scales in elasticity imaging : a numerical study. *J. Comput. Math.*, 28(3), p. 354–370, 2010.
- [AKL09] H. Ammari, H. Kang, and H. Lee. *Layer potential techniques in spectral analysis*, volume 153 of *Mathematical Surveys and Monographs*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2009.
- [AKLP10] H. Ammari, H. Kang, H. Lee, and W.-K. Park. Asymptotic imaging of perfectly conducting cracks. *SIAM J. Sci. Comput.*, 32(2), p. 894–922, 2010.
- [AKLZ10a] H. Ammari, H. Kang, M. Lim, and H. Zribi. Conductivity interface problems. I. Small perturbations of an interface. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 362(5), p. 2435–2449, 2010.
- [AKLZ10b] H. Ammari, H. Kang, M. Lim, and H. Zribi. Layer potential techniques in spectral analysis. I. Complete asymptotic expansions for eigenvalues of the Laplacian in domains with small inclusions. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 362(6), p. 2901–2922, 2010.
- [BAP06] N. Ben Abdallah and O. Pinaud. Multiscale simulation of transport in an open quantum system : resonances and WKB interpolation. *J. Comput. Phys.*, 213(1), p. 288–310, 2006.
- [BB80] P. Bérard and G. Besson. Spectres et groupes cristallographiques. II. Domaines sphériques. *Ann. Inst. Fourier (Grenoble)*, 30(3), p. 237–248, 1980.
- [BBDHTV11] V. Bonnaillie-Noël, D. Brancherie, M. Dambrine, F. Hérau, S. Tordeux, and G. Vial. Multiscale expansion and numerical approximation for surface defects. *ESAIM Proc.*, to appear, 2011.
- [BBDTV10] V. Bonnaillie-Noël, D. Brancherie, M. Dambrine, S. Tordeux, and G. Vial. Effect of micro-defects on structure failure : coupling asymptotic analysis and strong discontinuity approach. *Eur. Journal Comput. Mech.*, 2010(1-2-3), p. 165–175, 2010.

BIBLIOGRAPHIE

- [BBDTV11] V. Bonnaillie-Noël, D. Brancherie, M. Dambrine, S. Tordeux, and G. Vial. Accurate computations of profiles for geometrical defects in fracture mechanics. *In preparation*, 2011.
- [BBH98] D. Bucur, G. Buttazzo, and A. Henrot. Existence results for some optimal partition problems. *Adv. Math. Sci. Appl.*, 8(2), p. 571–579, 1998.
- [BBO10] B. Bourdin, D. Bucur, and É. Oudet. Optimal partitions for eigenvalues. *SIAM J. Sci. Comput.*, 31(6), p. 4100–4114, 2009/10.
- [BD06] V. Bonnaillie-Noël and M. Dauge. Asymptotics for the low-lying eigenstates of the Schrödinger operator with magnetic field near corners. *Ann. Henri Poincaré*, 7(5), p. 899–931, 2006.
- [BDFM99] F. Brosens, J. T. Devreese, V. M. Fomin, and V. V. Moshchalkov. Superconductivity in a wedge : analytical variational results. *Solid State Comm.*, 111(2), p. 565–569, 1999.
- [BDHV10] V. Bonnaillie-Noël, M. Dambrine, F. Hérau, and G. Vial. On generalized Ventcel’s type boundary conditions for Laplace operator in a bounded domain. *SIAM J. Math. Anal.*, 42(2), p. 931–945, 2010.
- [BDHV11] V. Bonnaillie-Noël, M. Dambrine, F. Hérau, and G. Vial. Absorbing conditions for the linear elasticity equations. *In preparation*, 2011.
- [BDMV07] V. Bonnaillie-Noël, M. Dauge, D. Martin, and G. Vial. Computations of the first eigenpairs for the Schrödinger operator with magnetic field. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 196(37-40), p. 3841–3858, 2007.
- [BDPR10] V. Bonnaillie-Noël, M. Dauge, N. Popoff, and N. Raymond. Discrete spectrum of a model Schrödinger operator on the half-plane with Neumann conditions. Prépublication IRMAR **10-64** (2010) <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00527643>.
- [BDTV07] V. Bonnaillie-Noël, M. Dambrine, S. Tordeux, and G. Vial. On moderately close inclusions for the Laplace equation. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 345(11), p. 609–614, 2007.
- [BDTV09] V. Bonnaillie-Noël, M. Dambrine, S. Tordeux, and G. Vial. Interactions between moderately close inclusions for the Laplace equation. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 19(10), p. 1853–1882, 2009.
- [BDVV06] D. Brancherie, M. Dambrine, G. Vial, and P. Villon. Ultimate load computation, effect of surfacic defect and adaptative techniques. In *7th World Congress in Computational Mechanics*, Los Angeles, 2006.
- [BDVV08] D. Brancherie, M. Dambrine, G. Vial, and P. Villon. Effect of surface defects on structure failure : a two-scale approach. *Eur. Journal Comput. Mech.*, 17(5-7), p. 613–624, 2008.
- [Bé89] P. Bérard. Variétés riemanniennes isospectrales non isométriques. *Astérisque*, (177-178) Exp. No. 705, p. 127–154, 1989. Séminaire Bourbaki, Vol. 1988/89.
- [Bé92] P. Bérard. Transplantation et isospectralité. I. *Math. Ann.*, 292(3), p. 547–559, 1992.
- [Bé93] P. Bérard. Transplantation et isospectralité. II. *J. London Math. Soc. (2)*, 48(3), p. 565–576, 1993.
- [BF07] V. Bonnaillie-Noël and S. Fournais. Superconductivity in domains with corners. *Rev. Math. Phys.*, 19(6), p. 607–637, 2007.
- [BFN09] V. Bonnaillie-Noël, A. Faraj, and F. Nier. Simulation of resonant tunneling heterostructures : numerical comparison of a complete Schrödinger-Poisson system and a reduced nonlinear model. *J. Comput. Elect.*, 8(1), p. 11–18, 2009.
- [BH11] V. Bonnaillie-Noël and B. Helffer. Numerical analysis of nodal sets for eigenvalues of Aharonov-Bohm hamiltonians on the square and application to minimal partitions. *Experimental Mathematics*, to appear, 2011.

- [BHB06] M. F. Ben Hassen and E. Bonnetier. An asymptotic formula for the voltage potential in a perturbed ϵ -periodic composite medium containing misplaced inclusions of size ϵ . *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A*, 136(4), p. 669–700, 2006.
- [BI04] D. Brancherie and A. Ibrahimbegović. Modélisation ‘macro’ de phénomènes localisés à l’échelle ‘micro’ : formulation et implantation numérique. *Revue européenne des éléments finis, numéro spécial Giens 2003*, 13 :461–473, 2004.
- [BHH09] V. Bonnaillie-Noël, B. Helffer, and T. Hoffmann-Ostenhof. Aharonov-Bohm Hamiltonians, isospectrality and minimal partitions. *J. Phys. A*, 42(18) 185203, 20, 2009.
- [BHV10] V. Bonnaillie-Noël, B. Helffer, and G. Vial. Numerical simulations for nodal domains and spectral minimal partitions. *ESAIM Control Optim. Calc. Var.*, 16(1), p. 221–246, 2010.
- [BI09] D. Brancherie and A. Ibrahimbegović. Novel anisotropic continuum-discrete damage model capable of representing localized failure of massive structures. part i : theoretical formulation and numerical implementation. *Engineering Computations*, 26(1-2), p. 100–127, 2009.
- [BNP06] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, and Y. Patel. Computing the steady states for an asymptotic model of quantum transport in resonant heterostructures. *J. Comput. Phys.*, 219(2), p. 644–670, 2006.
- [BNP08] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, and Y. Patel. Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells. I. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 25(5), p. 937–968, 2008.
- [BNP09] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, and Y. Patel. Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells. II. *J. Math. Soc. Japan*, 61(1), p. 65–106, 2009.
- [Bo03a] V. Bonnaillie. *Analyse mathématique de la supraconductivité dans un domaine à coins ; méthodes semi-classiques et numériques*. Thèse de doctorat, Université Paris XI - Orsay, 2003.
- [Bo03b] V. Bonnaillie. On the fundamental state for a Schrödinger operator with magnetic field in a domain with corners. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 336(2), p. 135–140, 2003.
- [Bo04] V. Bonnaillie-Noël. A posteriori error estimator for the eigenvalue problem associated to the Schrödinger operator with magnetic field. *Numer. Math.*, 99(2), p. 325–348, 2004.
- [Bo05a] V. Bonnaillie. On the fundamental state energy for a Schrödinger operator with magnetic field in domains with corners. *Asymptot. Anal.*, 41(3-4), p. 215–258, 2005.
- [Bo05b] V. Bonnaillie-Noël. Schrödinger operator with magnetic field in domain with corners. In *Journées “Équations aux Dérivées Partielles”*, Exp. No. II, 12 pages. École Polytech., Palaiseau, 2005.
- [Bo11] V. Bonnaillie-Noël. Harmonic oscillators with Neumann condition on the half-line. *Commun. Pure Appl. Anal.*, to appear, 2011.
- [Boz09] F. Bozorgnia. Numerical algorithm for spatial segregation of competitive systems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 31(5), p. 3946–3958, 2009.
- [BR99] J. Berger and J. Rubinstein. On the zero set of the wave function in superconductivity. *Comm. Math. Phys.*, 202(3), p. 621–628, 1999.
- [BS98] A. Bernoff and P. Sternberg. Onset of superconductivity in decreasing fields for general domains. *J. Math. Phys.*, 39(3), p. 1272–1284, 1998.
- [BV00] E. Bonnetier and M. Vogelius. An elliptic regularity result for a composite medium with “touching” fibers of circular cross-section. *SIAM J. Math. Anal.*, 31(3), p. 651–677 (electronic), 2000.

BIBLIOGRAPHIE

- [CBH05] O. Cybulski, V. Babin, and R. Hołyst. Minimization of the Renyi entropy production in the space-partitioning process. *Phys. Rev. E* (3), 71(4) 046130, 10, 2005.
- [CD96] M. Costabel and M. Dauge. A singularly perturbed mixed boundary value problem. *Comm. Partial Differential Equations*, 21 :1919–1949, 1996.
- [CDN10] G. Cardone, T. Durante, and S. A. Nazarov. The localization effect for eigenfunctions of the mixed boundary value problem in a thin cylinder with distorted ends. *SIAM J. Math. Anal.*, 42(6), p. 2581–2609, 2010.
- [Ch94] S. J. Chapman. Nucleation of superconductivity in decreasing fields. I. *European J. Appl. Math.*, 5(4), p. 449–468, 1994.
- [CL07] L. A. Cafferelli and F. H. Lin. An optimal partition problem for eigenvalues. *J. Sci. Comput.*, 31(1-2), p. 5–18, 2007.
- [CLLL04] S.-M. Chang, C.-S. Lin, T.-C. Lin, and W.-W. Lin. Segregated nodal domains of two-dimensional multispecies Bose-Einstein condensates. *Phys. D*, 196(3-4), p. 341–361, 2004.
- [CLPRS07] E. Chahine, P. Laborde, J. Pommier, Y. Renard, and M. Salaün. Study of some optimal XFEM type methods. In *Advances in meshfree techniques*, volume 5 of *Comput. Methods Appl. Sci.*, pages 27–38. Springer, Dordrecht, 2007.
- [CTV03] M. Conti, S. Terracini, and G. Verzini. An optimal partition problem related to nonlinear eigenvalues. *J. Funct. Anal.*, 198(1), p. 160–196, 2003.
- [CTV05a] M. Conti, S. Terracini, and G. Verzini. On a class of optimal partition problems related to the Fučík spectrum and to the monotonicity formulae. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, 22(1), p. 45–72, 2005.
- [CTV05b] M. Conti, S. Terracini, and G. Verzini. A variational problem for the spatial segregation of reaction-diffusion systems. *Indiana Univ. Math. J.*, 54(3), p. 779–815, 2005.
- [CV03] Y. Capdeboscq and M. S. Vogelius. A general representation formula for boundary voltage perturbations caused by internal conductivity inhomogeneities of low volume fraction. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37(1), p. 159–173, 2003.
- [dGSJ63] P.-G. De Gennes and D. Saint-James. Onset of superconductivity in decreasing fields. *Physics Letters*, 7(5), p. 306–308, 1963.
- [DH93] M. Dauge and B. Helffer. Eigenvalues variation. I. Neumann problem for Sturm-Liouville operators. *J. Differential Equations*, 104(2), p. 243–262, 1993.
- [DNBL90] M. Dauge, S. Nicaise, M. Bourlard, and J. M.-S. Lubuma. Coefficients des singularités pour des problèmes aux limites elliptiques sur un domaine à points coniques. I. Résultats généraux pour le problème de Dirichlet. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.*, 24(1), p. 27–52, 1990.
- [dPFS00] M. del Pino, P. L. Felmer, and P. Sternberg. Boundary concentration for eigenvalue problems related to the onset of superconductivity. *Comm. Math. Phys.*, 210(2), p. 413–446, 2000.
- [DTV10] M. Dauge, S. Tordeux, and G. Vial. Selfsimilar perturbation near a corner : matching versus multiscale expansions for a model problem. In *Around the research of Vladimir Maz’ya. II*, volume 12 of *Int. Math. Ser. (N. Y.)*, pages 95–134. Springer, New York, 2010.
- [DV05] M. Dambrine and G. Vial. On the influence of a boundary perforation on the dirichlet energy. *Control and Cybernetics*, 34(1), p. 117–136, 2005.
- [DV07] M. Dambrine and G. Vial. A multiscale correction method for local singular perturbations of the boundary. *M2AN*, 41(1), p. 111–127, 2007.
- [FDM98] V. M. Fomin, J. T. Devreese, and V. V. Moshchalkov. Surface superconductivity in a wedge. *Europhys. Lett.*, 42(5), p. 553–558, 1998.

-
- [FH05] S. Fournais and B. Helffer. Energy asymptotics for type II superconductors. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, 24(3), p. 341–376, 2005.
 - [FH06a] S. Fournais and B. Helffer. On the third critical field in Ginzburg-Landau theory. *Comm. Math. Phys.*, 266(1), p. 153–196, 2006.
 - [FH06b] S. Fournais and B. Helffer. Accurate eigenvalue asymptotics for the magnetic Neumann Laplacian. *Ann. Inst. Fourier (Grenoble)*, 56(1), p. 1–67, 2006.
 - [FH09] S. Fournais and B. Helffer. On the Ginzburg-Landau critical field in three dimensions. *Comm. Pure Appl. Math.*, 62(2), p. 215–241, 2009.
 - [FH10] S. Fournais and B. Helffer. *Spectral methods in surface superconductivity*. Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, 77. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 2010.
 - [FK08] P. Freitas and D. Krejčířík. Location of the nodal set for thin curved tubes. *Indiana Univ. Math. J.*, 57(1), p. 343–375, 2008.
 - [GP02] T. Giorgi and D. Phillips. The breakdown of superconductivity due to strong fields for the Ginzburg-Landau model. *SIAM Rev.*, 44(2), p. 237–256 (electronic), 2002. Reprinted from *SIAM J. Math. Anal.* **30** (1999), no. 2, 341–359 [MR 2002b :35235].
 - [He88] B. Helffer. *Semi-classical analysis for the Schrödinger operator and applications*, volume 1336 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1988.
 - [He10] B. Helffer. On spectral minimal partitions : a survey. *Milan J. Math.*, 78 :575–590, 2010.
 - [He11] B. Helffer. Introduction to some conjectures for spectral minimal partitions. *J. Egypt. Math. Soc.*, to appear, 2011.
 - [HH10a] B. Helffer and T. Hoffmann-Ostenhof. On minimal partitions : new properties and applications to the disk. In *Spectrum and dynamics*, volume 52 of *CRM Proc. Lecture Notes*, pages 119–135. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2010.
 - [HH10b] B. Helffer and T. Hoffmann-Ostenhof. Remarks on two notions of spectral minimal partitions. *Adv. Math. Sci. Appl.*, 20(1), p. 249–263, 2010.
 - [HHHO99] B. Helffer, M. Hoffmann-Ostenhof, T. Hoffmann-Ostenhof, and M. P. Owen. Nodal sets for groundstates of Schrödinger operators with zero magnetic field in non-simply connected domains. *Comm. Math. Phys.*, 202(3), p. 629–649, 1999.
 - [HHT09] B. Helffer, T. Hoffmann-Ostenhof, and S. Terracini. Nodal domains and spectral minimal partitions. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 26(1), p. 101–138, 2009.
 - [HHT10a] B. Helffer, T. Hoffmann-Ostenhof, and S. Terracini. Nodal minimal partitions in dimension 3. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 28(2), p. 617–635, 2010.
 - [HHT10b] B. Helffer, T. Hoffmann-Ostenhof, and S. Terracini. On spectral minimal partitions : the case of the sphere. In *Around the research of Vladimir Maz’ya. III*, volume 13 of *Int. Math. Ser. (N. Y.)*, pages 153–178. Springer, New York, 2010.
 - [HJ01] H. Haddar and P. Joly. Effective boundary conditions for thin ferromagnetic coatings. Asymptotic analysis of the 1D model. *Asymptot. Anal.*, 27(2), p. 127–160, 2001.
 - [HM96] B. Helffer and A. Mohamed. Semiclassical analysis for the ground state energy of a Schrödinger operator with magnetic wells. *J. Funct. Anal.*, 138(1), p. 40–81, 1996.
 - [HM01] B. Helffer and A. Morame. Magnetic bottles in connection with superconductivity. *J. Funct. Anal.*, 185(2), p. 604–680, 2001.
 - [HM02] B. Helffer and A. Morame. Magnetic bottles for the Neumann problem : the case of dimension 3. *Proc. Indian Acad. Sci. Math. Sci.*, 112(1), p. 71–84, 2002. Spectral and inverse spectral theory (Goa, 2000).

BIBLIOGRAPHIE

- [HM04] B. Helffer and A. Morame. Magnetic bottles for the Neumann problem : curvature effects in the case of dimension 3 (general case). *Ann. Sci. École Norm. Sup. (4)*, 37(1), p. 105–170, 2004.
- [HP03] B. Helffer and X.-B. Pan. Upper critical field and location of surface nucleation of superconductivity. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 20(1), p. 145–181, 2003.
- [Il92] A.M. Il'in. Matching of asymptotic expansions of solutions of boundary value problems. *Translations of Mathematical Monographs*, 1992.
- [Ja01] H. T. Jadallah. The onset of superconductivity in a domain with a corner. *J. Math. Phys.*, 42(9), p. 4101–4121, 2001.
- [Ja10] R. Janane. Computation of the eigenpairs for a linear differential operator using a variational approximation with finite elements and numerical quadrature. *Appl. Comput. Math.*, 9(1), p. 57–76, 2010.
- [JLNP06] D. Jakobson, M. Levitin, N. Nadirashvili, and I. Polterovich. Spectral problems with mixed Dirichlet-Neumann boundary conditions : isospectrality and beyond. *J. Comput. Appl. Math.*, 194(1), p. 141–155, 2006.
- [JLPS95] G. Jona-Lasinio, C. Presilla, and J. Sjöstrand. On Schrödinger equations with concentrated nonlinearities. *Ann. Physics*, 240(1), p. 1–21, 1995.
- [JT06] P. Joly and S. Tordeux. Matching of asymptotic expansions for wave propagation in media with thin slots i : The asymptotic expansion. *Multiscale Modeling and Simulation : A SIAM Interdisciplinary Journal*, 5(1), p. 304–336, 2006.
- [Lé] C. Léna. *en cours*. Thèse de doctorat, Université Paris XI - Orsay.
- [LKF04] S. E. Laux, A. Kumar, and M. V. Fischetti. Analysis of quantum ballistic electron transport in ultra-small semiconductor devices including space-charge effects. *J. Appl. Phys.*, 95 :5545–5582, 2004.
- [LP99] K. Lu and X.-B. Pan. Estimates of the upper critical field for the Ginzburg-Landau equations of superconductivity. *Phys. D*, 127(1-2), p. 73–104, 1999.
- [LP00] K. Lu and X.-B. Pan. Surface nucleation of superconductivity in 3-dimensions. *J. Differential Equations*, 168(2), p. 386–452, 2000. Special issue in celebration of Jack K. Hale's 70th birthday, Part 2 (Atlanta, GA/Lisbon, 1998).
- [LPP06] M. Levitin, L. Parnowski, and I. Polterovich. Isospectral domains with mixed boundary conditions. *J. Phys. A*, 39(9), p. 2073–2082, 2006.
- [LS00] T. Lewiński and J. Sokołowski. Topological derivative for nucleation of non-circular voids. The Neumann problem. In *Differential geometric methods in the control of partial differential equations (Boulder, CO, 1999)*, volume 268 of *Contemp. Math.*, pages 341–361. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2000.
- [Ma07] D. Martin. MÉLINA, bibliothèque de calculs éléments finis. <http://perso.univ-rennes1.fr/daniel.martin/melina>, 2007.
- [MB96] J. M. Melenk and I. Babuška. The partition of unity finite element method : basic theory and applications. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 139(1-4), p. 289–314, 1996.
- [MNP00a] V. Maz'ya, S. Nazarov, and B. Plamenevskij. *Asymptotic theory of elliptic boundary value problems in singularly perturbed domains. Vol. I*, volume 111 of *Operator Theory : Advances and Applications*. Birkhäuser Verlag, Basel, 2000.
- [MNP00b] V. Maz'ya, S. Nazarov, and B. Plamenevskij. *Asymptotic theory of elliptic boundary value problems in singularly perturbed domains. Vol. II*, volume 112 of *Operator Theory : Advances and Applications*. Birkhäuser Verlag, Basel, 2000.

-
- [NO93] S. A. Nazarov and M. V. Olyushin. Perturbation of the eigenvalues of the Neumann problem due to the variation of the domain boundary. *Algebra i Analiz*, 5(2), p. 169–188, 1993.
 - [NP04] F. Nier and M. Patel. Nonlinear asymptotics for quantum out-of-equilibrium 1D systems : reduced models and algorithms. In *Multiscale methods in quantum mechanics*, Trends Math., pages 99–111. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2004.
 - [NS03] S. A. Nazarov and J. Sokołowski. Asymptotic analysis of shape functionals. *J. Math. Pures Appl.* (9), 82(2), p. 125–196, 2003.
 - [NT09] B. Noris and S. Terracini. Nodal sets of magnetic Schrödinger operators of Aharonov–Bohm type and energy minimizing partitions. *Indiana Univ. Math. J.*, to appear, 2009.
 - [NU95] G. Nakamura and G. Uhlmann. Inverse problems at the boundary for an elastic medium. *SIAM J. Math. Anal.*, 26(2), p. 263–279, 1995.
 - [Pa02] X.-B. Pan. Upper critical field for superconductors with edges and corners. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, 14(4), p. 447–482, 2002.
 - [Pa05] M. Patel. *Développement de modèles macroscopiques pour des systèmes quantiques non-linéaires hors-équilibre*. Thèse de doctorat, Université Rennes 1, 2005.
 - [Pi03] O. Pinaud. *Analyse mathématique et numérique de quelques problèmes de transport dans les nanostructures*. Thèse de doctorat, Université P. Sabatier, Toulouse, 2003.
 - [Pl56] Å. Pleijel. Remarks on Courant’s nodal line theorem. *Comm. Pure Appl. Math.*, 9 :543–550, 1956.
 - [Po] N. Popoff. *en cours*. Thèse de doctorat, Université Rennes 1.
 - [PS96] C. Presilla and J. Sjöstrand. Transport properties in resonant tunneling heterostructures. *J. Math. Phys.*, 37(10), p. 4816–4844, 1996.
 - [Ra09] N. Raymond. *Méthodes spectrales et théorie des cristaux liquides*. Thèse de doctorat, Université Paris Sud - Paris XI, 2009.
 - [Ra10] N. Raymond. On the semi-classical 3D Neumann Laplacian with variable magnetic field. *Asymptotic Analysis*, 68(1-2), p. 1– 40, 2010.
 - [RS78] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics. IV. Analysis of operators*. Academic Press [Harcourt Brace Jovanovich Publishers], New York, 1978.
 - [Sh05] J. R. Shewchuk. Triangle : A two-dimensional quality mesh generator and Delaunay triangulator. <http://www.cs.cmu.edu/~quake/triangle.html>, 2005.
 - [SP99] V. A. Schweigert and F. M. Peeters. Influence of the confinement geometry on surface superconductivity. *Phys. Rev. B*, 60(5), p. 3084–3087, 1999.
 - [Ti96] M. Tinkham. *Introduction to superconductivity*. McGraw Hill, 1996.
 - [TVD06] S. Tordeux, G. Vial, and M. Dauge. Matching and multiscale expansions for a model singular perturbation problem. *C. R. Acad. Sci.*, 343(10), p. 637–642, 2006.
 - [VV00] M. S. Vogelius and D. Volkov. Asymptotic formulas for perturbations in the electromagnetic fields due to the presence of inhomogeneities of small diameter. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 34(4), p. 723–748, 2000.

BIBLIOGRAPHIE

Bibliographie personnelle

Analyse mathématique de la supraconductivité

- [AB03] F. Alouges and V. Bonnaillie. Analyse numérique de la supraconductivité. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 337(8), p. 543–548, 2003.
- [AB06] F. Alouges and V. Bonnaillie-Noël. Numerical computations of fundamental eigenstates for the Schrödinger operator under constant magnetic field. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 22(5), p. 1090–1105, 2006.
- [Bo03a] V. Bonnaillie. *Analyse mathématique de la supraconductivité dans un domaine à coins ; méthodes semi-classiques et numériques*. Thèse de doctorat, Université Paris XI - Orsay, 2003.
- [Bo03b] V. Bonnaillie. On the fundamental state for a Schrödinger operator with magnetic field in a domain with corners. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 336(2), p. 135–140, 2003.
- [Bo04] V. Bonnaillie-Noël. A posteriori error estimator for the eigenvalue problem associated to the Schrödinger operator with magnetic field. *Numer. Math.*, 99(2), p. 325–348, 2004.
- [Bo05a] V. Bonnaillie. On the fundamental state energy for a Schrödinger operator with magnetic field in domains with corners. *Asymptot. Anal.*, 41(3-4), p. 215–258, 2005.
- [Bo05b] V. Bonnaillie-Noël. Schrödinger operator with magnetic field in domain with corners. In *Journées “Équations aux Dérivées Partielles”*, Exp. No. II, 12 pages. École Polytech., Palaiseau, 2005.
- [Bo11] V. Bonnaillie-Noël. Harmonic oscillators with Neumann condition on the half-line. *Commun. Pure Appl. Anal.*, to appear, 2011.
- [BD06] V. Bonnaillie-Noël and M. Dauge. Asymptotics for the low-lying eigenstates of the Schrödinger operator with magnetic field near corners. *Ann. Henri Poincaré*, 7(5), p. 899–931, 2006.
- [BDMV07] V. Bonnaillie-Noël, M. Dauge, D. Martin, and G. Vial. Computations of the first eigenpairs for the Schrödinger operator with magnetic field. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 196(37-40), p. 3841–3858, 2007.
- [BDPR10] V. Bonnaillie-Noël, M. Dauge, N. Popoff, and N. Raymond. Discrete spectrum of a model Schrödinger operator on the half-plane with Neumann conditions. Prépublication IRMAR **10-64** (2010) <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00527643>.
- [BF07] V. Bonnaillie-Noël and S. Fournais. Superconductivity in domains with corners. *Rev. Math. Phys.*, 19(6), p. 607–637, 2007.

Modèle de transport quantique dans les semi-conducteurs

- [BFN09] V. Bonnaillie-Noël, A. Faraj, and F. Nier. Simulation of resonant tunneling heterostructures : numerical comparison of a complete Schrödinger-Poisson system and a reduced nonlinear model. *J. Comput. Elect.*, 8(1), p. 11–18, 2009.

- [BNP06] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, and Y. Patel. Computing the steady states for an asymptotic model of quantum transport in resonant heterostructures. *J. Comput. Phys.*, 219(2), p. 644–670, 2006.
- [BNP08] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, and Y. Patel. Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells. I. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 25(5), p. 937–968, 2008.
- [BNP09] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, and Y. Patel. Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells. II. *J. Math. Soc. Japan*, 61(1), p. 65–106, 2009.

Analyse multi-échelle et numérique de problèmes elliptiques perturbés

- [BBDHTV11] V. Bonnaillie-Noël, D. Brancherie, M. Dambrine, F. Hérau, S. Tordeux, and G. Vial. Multiscale expansion and numerical approximation for surface defects. *ESAIM Proc.*, to appear, 2011.
- [BBDTV10] V. Bonnaillie-Noël, D. Brancherie, M. Dambrine, S. Tordeux, and G. Vial. Effect of micro-defects on structure failure : coupling asymptotic analysis and strong discontinuity approach. *Eur. Journal Comput. Mech.*, 2010(1-2-3), p. 165–175, 2010.
- [BBDTV11] V. Bonnaillie-Noël, D. Brancherie, M. Dambrine, S. Tordeux, and G. Vial. Accurate computations of profiles for geometrical defects in fracture mechanics. *In preparation*, 2011.
- [BDHV10] V. Bonnaillie-Noël, M. Dambrine, F. Hérau, and G. Vial. On generalized Ventcel’s type boundary conditions for Laplace operator in a bounded domain. *SIAM J. Math. Anal.*, 42(2), p. 931–945, 2010.
- [BDHV11] V. Bonnaillie-Noël, M. Dambrine, F. Hérau, and G. Vial. Absorbing conditions for the linear elasticity equations. *In preparation*, 2011.
- [BDTV07] V. Bonnaillie-Noël, M. Dambrine, S. Tordeux, and G. Vial. On moderately close inclusions for the Laplace equation. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 345(11), p. 609–614, 2007.
- [BDTV09] V. Bonnaillie-Noël, M. Dambrine, S. Tordeux, and G. Vial. Interactions between moderately close inclusions for the Laplace equation. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 19(10), p. 1853–1882, 2009.

Partitions minimales et nodales

- [BH11] V. Bonnaillie-Noël and B. Helffer. Numerical analysis of nodal sets for eigenvalues of Aharonov-Bohm hamiltonians on the square and application to minimal partitions. *Experimental Mathematics*, to appear, 2011.
- [BHH09] V. Bonnaillie-Noël, B. Helffer, and T. Hoffmann-Ostenhof. Aharonov-Bohm Hamiltonians, isospectrality and minimal partitions. *J. Phys. A*, 42(18) 185203, 20, 2009.
- [BHV10] V. Bonnaillie-Noël, B. Helffer, and G. Vial. Numerical simulations for nodal domains and spectral minimal partitions. *ESAIM Control Optim. Calc. Var.*, 16(1), p. 221–246, 2010.

Résumé :

Mes travaux de recherche concernent l'analyse asymptotique, l'approximation numérique et la théorie spectrale de problèmes elliptiques et ont pris quatre directions essentielles : l'analyse de la supraconductivité dans les domaines à coins, le transport quantique dans des diodes à effet tunnel résonant, l'analyse de perturbations géométriques sur la solution de problèmes elliptiques et le lien entre partitions minimales et nodales.

J'allie les résultats théoriques et les simulations numériques pour préciser le comportement des solutions : la théorie permettant de proposer des méthodes numériques plus performantes et de prévoir certaines difficultés numériques, les simulations illustrant parfois des comportements plus fins que ceux démontrés jusque-là ou suggérant de nouvelles conjectures.

Mots-clés :

Analyse numérique, équations aux dérivées partielles, opérateurs de Schrödinger, Schrödinger-Poisson, Laplace, Navier, fonctionnelle de Ginzburg-Landau, développement asymptotique, théorie spectrale, simulations numériques, éléments finis, estimations d'erreur, conditions artificielles de Ventcel.



IRMAR, ENS Cachan - Bretagne, CNRS, UEB
Campus de Ker Lann
F-35170 Bruz, France



IRMAR, Université Rennes 1, CNRS, UEB
Campus de Beaulieu
F-35042 Rennes, France